

SÉRIE A, N° 1808

N° D'ORDRE :

2674

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Assène DATZEFF

1^{re} THÈSE. — SUR LE PROBLÈME DES BARRIÈRES DE POTENTIEL
ET LA RÉOLUTION DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDIN-
GER.

2^e THÈSE. — PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ.

Soutenues le **Juin 1938** devant la Commission d'examen.

1938 JUIN 1938

MM. GARNIER..... *Président.*

L. de BROGLIE..... }
F. PERRIN..... } *Examineurs.*

PARIS

MASSON ET C^{ie}, ÉDITEURS

LIBRAIRES DE L'ACADÉMIE DE MÉDECINE

120, BOULEVARD SAINT-GERMAIN

1938

RIJKSUNIVERSITEIT LEIDEN



0535 5123

SÉRIE A, N° 1808

N° D'ORDRE :

2674

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Assène DATZEFF

1^{re} THÈSE. — SUR LE PROBLÈME DES BARRIÈRES DE POTENTIEL
ET LA RÉOLUTION DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDIN-
GER.

2^e THÈSE. — PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ.

Soutenues le **Juin 1938** devant la Commission d'examen.

13 JUN 1938

MM. GARNIER..... *Président.*

L. de BROGLIE..... }
F. PERRIN..... } *Examineurs.*

PARIS

MASSON ET C^{ie}, ÉDITEURS

LIBRAIRES DE L'ACADÉMIE DE MÉDECINE

120, BOULEVARD SAINT-GERMAIN

1938

MM.

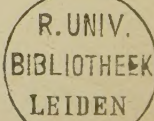
Doyen honoraire..... M. MOLLIARD.
Doyen..... C. MAURAIN, *Professeur*, Physique du Globe.

<i>Professeurs honoraires.</i>	H. LEHESGUE. A. FERNBACH. Émile PICARD. Léon BRILLOUIN. GUILLET. PÉCHARD. FREUNDLER. AUGER.	BLAISE. DANGEARD. LESPIEAU. MARCHIS. VESSOT. PORTIER. MOLLIARD. LAPICQUE.	G. BERTRAND. ABRAHAM. Ch. FABRY. Léon BERTRAND. WINTREBERT. DUBOSQ. BOHN.
--------------------------------	--	--	---

PROFESSEURS

M. CAULLERY.....	T Zoologie (Évolution des êtres organisés).	II. BEGHIN.....	T Mécanique physique et expérimentale.
G. URBAIN.....	T Chimie générale.	FOCH.....	Mécanique expérimentale des fluides.
Émile BOREL.....	T Calcul des probabilités et Physique mathématique.	PAUTHENIER.....	Physique (P. C. B.).
Jean PERRIN.....	T Chimie physique.	De BROGLIE.....	T Théories physiques.
E. CARTAN.....	T Géométrie supérieure.	CHRÉTIEN.....	Optique appliquée.
A. COTTON.....	T Recherches physiques.	P. JOB.....	Chimie générale.
J. DRACH.....	T Analyse supérieure et Algèbre supérieure.	LABROUSTE.....	Physique du Globe.
Charles PÉREZ. ..	T Zoologie.	PRENANT.....	T Anatomie et Histologie comparées.
E. RABAUD.....	T Biologie expérimentale.	VILLEY.....	Mécanique physique et expérimentale.
M. GUICHARD.....	Chimie minérale.	COMBES.....	T Physiologie végétale.
Paul MONTEL.....	T Théorie des fonctions et Théorie des transformations.	GARNIER.....	T Mathématiques générales.
L. BLARINGHEM..	T Botanique.	PÈRES.....	Mécan. théor. des fluides.
G. JULIA.....	T Mécanique analytique et Mécanique céleste.	HACKSPILL.....	Chimie (P. C. B.).
C. MAUGUIN.....	T Minéralogie.	LAUGIER.....	T Physiologie générale.
A. MICHEL-LÉVY.	T Pétrographie.	TOUSSAINT.....	Technique Aéronautique.
H. BÉNARD.....	T Mécanique expérimentale des fluides.	M. CURIE.....	Physique (P. C. B.).
A. DENJOY.....	T Application de l'analyse à la Géométrie.	G. RIBAUD.....	T Hautes températures.
L. LUTAUD.....	T Géographie physique et géologie dynamique.	CHAZY.....	T Mécanique rationnelle.
Eugène BLOCH....	T Physique.	GAULT.....	Chimie (P. C. B.).
G. BRUHAT.....	T Physique.	DUPONT.....	Recherches physiques.
E. DARMOIS.....	T Enseignement de Physique.	DUPONT.....	T Théories chimiques.
A. DEBIERNE.....	T Physique Générale et Radioactivité.	LANQUÏNE.....	T Géologie structurale et géologie appliquée.
A. DUFOUR.....	T Physique (P. C. B.).	VALIRON.....	Mathématiques générales.
L. DUNOYER.....	Optique appliquée.	BARRABÉ.....	Géologie structurale et géologie appliquée.
A. GUILLIERMOND.	T Botanique.	MILLOT.....	Biologie animale (P.C.B.).
M. JAVILLIER.....	Chimie biologique.	F. PERRIN.....	Théories physiques.
ROBERT-LÉVY....	T Physiologie comparée.	VAVON.....	Chimie organique.
F. PICARD.....	Zoologie (Évolution des êtres organisés).	G. DARMOIS.....	Calcul des Probabilités et Physique-Mathématique.
Henri VILLAT.....	T Mécanique des fluides et applications.	CHATTON.....	T Biologie maritime.
Ch. JACOB.....	T Géologie.	AUBEL.....	Chimie biologique.
P. PASCAL.....	T Chimie minérale.	Jacques BOURCART.	Géographie physique et géologie dynamique.
M. FRÉCHET.....	T Calcul différentiel et Calcul intégral.	M ^{me} JOLIOT-CURIE.	Physique générale et Radioactivité.
E. ESCLANGON....	T Astronomie.	PLANTEFOL.....	Biologie végétale (P.C B.).
M ^{me} RAMART-LUCAS	T Chimie organique.	CABANNES.....	Enseignement de Physique.
		GRASSÉ.....	Biologie animale (P. C. B.).
		PRÉVOST.....	Chimie (P. C. B.).

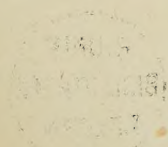
Secrétaire..... A. PACAUD.
Secrétaire honoraire..... D. TOMBECK.



A MES PARENTS

A Monsieur le Professeur LOUIS DE BROGLIE

*En témoignage de mon profond respect
et de ma très vive reconnaissance.*



SUR LE PROBLÈME DES BARRIÈRES DE POTENTIEL ET LA RÉOLUTION DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

Par M. DATZEEF

INTRODUCTION

Le problème des barrières de potentiel est d'un emploi courant dans l'Optique ondulatoire classique, mais il est d'une importance particulière dans la Mécanique ondulatoire. Ce problème fait ressortir clairement certaines différences entre la Mécanique ancienne et la Mécanique ondulatoire. Plusieurs problèmes de cette dernière mécanique peuvent être résolus approximativement avec l'emploi des barrières de potentiel. On remplace, par exemple, la courbe potentielle dans un domaine où le potentiel varie vite, par un mur de potentiel, et une montagne de potentiel par une barrière de forme simple, surtout rectiligne. Dans d'autres cas, où la courbe potentielle forme une suite de montagnes de potentiel, on peut remplacer ces dernières par une suite de barrières simples. On doit alors répéter plusieurs fois les calculs concernant une barrière simple.

Dans les pages qui suivent nous développons cette idée, qui consiste à remplacer une barrière donnée par une suite de barrières rectangulaires. Le problème est facile à poser dans le cas des mouvements qui intéressent une seule dimension. En employant les notations vectorielles, nous avons trouvé une matrice de transformation, qui lie les amplitudes

de l'onde incidente et réfléchiée, et celle de l'onde transmise. Cette matrice permet d'exprimer le coefficient de réflexion et le coefficient de transmission de la barrière donnée. Comme conséquence de ces formules on tire la résolution de l'équation de Schrödinger en séries d'intégrales multiples. A l'aide d'une matrice majorante on démontre la convergence absolue de ces séries dans tout intervalle, qui ne contient pas les points singuliers de la fonction potentielle, et les points de rebroussement de l'ancienne Mécanique. Pour tous ces points on fait des considérations à part.

La première solution approximative trouvée d'après cette méthode coïncide avec la solution approximative que l'on obtient par la méthode de Brillouin-Wentzel. Il résulte de l'étude que nous faisons que l'emploi de cette dernière méthode pour le calcul des coefficients de réflexion et de transmission est légitime pour des barrières, à l'intérieur desquelles la fonction d'onde devient infinie aux points de rebroussement.

Nous avons ensuite développé une deuxième méthode de résolution de l'équation d'onde. Les calculs ont été effectués à l'aide des matrices, comme précédemment. L'application de cette méthode au cas où la fonction potentielle est linéaire, nous a donné très facilement la solution connue de l'équation d'onde, exprimée par les séries de Bessel.

Dans un chapitre suivant nous avons généralisé la méthode de résolution de l'équation d'onde à une variable indépendante pour l'équation d'onde à plusieurs corpuscules en mouvement quelconque, en commençant par le problème du mouvement de deux corpuscules sur une ligne droite. L'intégrale de l'équation a été écrite à l'aide de deux matrices de transformation, qui ont tout à fait la forme de la matrice de transformation du problème à une dimension. Pour le problème à n corpuscules on a à écrire $3n$ matrices de la même forme. Presque toutes les considérations faites dans le cas du problème à une dimension se transportent facilement au pro-

blème généralisé, et nous ne les avons pas refaites en détail dans ce dernier cas.

A la fin nous avons employé la méthode de décomposition d'une barrière de potentiel pour trouver la solution de l'équation relativiste de Dirac pour le problème à une seule dimension. En première approximation d'après cette méthode nous avons retrouvé la solution approximative, donnée par M. Pauli.

Dans toutes les considérations qui suivent on devait se servir de plusieurs faits de la théorie des barrières de potentiel. Aussi avons-nous fait un bref exposé de cette théorie, en se servant principalement du cours de M. Louis de Broglie [3]. De tout cela nous tenons à exprimer notre reconnaissance profonde à M. Louis de Broglie, aussi bien de l'intérêt bienveillant qu'il a accordé à ce travail.

CHAPITRE PREMIER

1. Généralités sur les barrières de potentiel.

Tous les problèmes en Mécanique ondulatoire consistent à étudier la propagation des ondes associées aux corpuscules matériels. A tout corpuscule de masse m , d'énergie E , en l'absence de champ extérieur est associée une onde de de Broglie de longueur d'onde λ :

$$(1) \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

où h est la constante de Planck. Quand le corpuscule se trouve dans un champ extérieur donné $U(x, y, z, t)$ la longueur d'onde λ de l'onde associée et l'indice de réfraction n sont définis par :

$$(2) \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E-U)}}, \quad n = \sqrt{\frac{E-U}{E}},$$

et la fonction d'onde Φ satisfait à l'équation de Schrödinger :

$$(3) \quad \Delta\Phi - \frac{8\pi^2m}{h^2} U\Phi = \frac{4\pi im}{h} \frac{\partial\Phi}{\partial t}.$$

Si le champ extérieur ne contient pas le temps, l'équation (3) admet pour solution les ondes stationnaires

$\Phi = \Psi(x, y, z)e^{\frac{2\pi i}{h}Et}$, et l'amplitude Ψ satisfait à l'équation de Schrödinger :

$$(4) \quad \Delta\Psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - U(x, y, z)]\Psi = 0.$$

Tous les problèmes en Mécanique ondulatoire non relativiste sont liés à la résolution de l'équation de Schrödinger. Malheureusement cette résolution n'est pas facile même dans les cas simples. Dans des cas plus compliqués, par exemple celui de plusieurs corpuscules en interaction mutuelle, on ne peut aborder directement ce problème. Pour le problème de Hélium — deux électrons en mouvement autour d'un noyau — on trouve des résultats approximatifs et surtout qualitatifs avec des approximations successives. Même le problème à une seule dimension est résolu complètement dans peu de cas, quand la fonction potentielle a la forme d'un polynôme de degré pas très élevé, ou d'un rapport de polynômes de ce genre [4]. Pour les différents cas qui se présentent dans la pratique, il existe des méthodes d'approximation pour résoudre l'équation d'onde. Nous allons exposer la méthode de Brillouin-Wentzel-Kramers dont on se sert très souvent.

2. Méthode de Brillouin-Wentzel [5, 6].

L'équation de Schrödinger (5) prendra la forme suivante dans le cas de mouvement d'un corpuscule sur une ligne droite que nous prendrons pour l'axe OX :

$$(5) \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - U(x)]\Psi = 0.$$

On cherche la solution de (5) sous la forme :

$$(6) \quad \Psi = e^{\frac{2\pi i}{h} \int^x y dx}$$

On développe la fonction $y(x)$ en série de puissances de $\frac{h}{2\pi i}$:

$$(7) \quad y = \sum_{v=0}^{\infty} \left(\frac{h}{2\pi i} \right)^v y_v = y_0(x) + \frac{h}{2\pi i} y_1(x) + \left(\frac{h}{2\pi i} \right)^2 y_2(x) + \dots$$

En tenant compte de (7), remplaçons Ψ (6) dans (5). En annulant les coefficients des diverses puissances de $\frac{h}{2\pi i}$, on trouve les formules de récurrence :

$$(8) \quad y'_{j-1} + \sum_{v=1}^j y_v y_{j-v} = 0, \quad j = 1, 2, \dots$$

et explicitement les premiers termes de y :

$$(9) \quad y_0^2 = 2m[E - U(x)], \quad y_1 = \frac{-y'_0}{2y_0}, \quad y_2 = -\frac{y'_1 + y_1^2}{2y_0}, \dots$$

On se sert ordinairement des deux premiers termes y_0 et y_1 :

$$(10) \quad \Psi = \frac{1}{\sqrt[4]{2m(E-U)}} e^{\pm \frac{2\pi i}{h} \int^x \sqrt{2m(E-U)} dx}.$$

L'intégrale dans l'exposant de (10) est la fonction « raccourcie » de Jacobi. On retrouve cette fonction toujours quand l'approximation de l'optique géométrique est valable, et l'on doit s'attendre à ce que la forme (10) de Ψ corresponde à cette approximation.

Essayons de nous rendre compte du degré d'approximation que nous aurons, en ne retenant que les deux premiers termes du développement (8). Pour cela il faut voir dans quelle condition le terme y_2 est négligeable devant y_1 . D'après (2) y_0 est proportionnel à n , et de (9) on aura :

$$y_1 = -\frac{y'_0}{2y_0} = -\frac{\frac{dn}{dx}}{2n}.$$

D'après (9) la valeur de y_2 est voisine de $-\frac{y_1^2}{2y_0} = -\frac{\left(\frac{dn}{dx}\right)^2}{4n^2 y_0}$.

On voit que l'on peut négliger y_2 devant y_1 si $\frac{y_2}{y_1} \ll 1$, ou si :

$$(11) \quad \frac{1}{n} \frac{dn}{dx} \lambda \ll 1.$$

Donc il sera légitime de se servir de la fonction approximative (10) quand l'indice de réfraction n varie lentement à l'échelle de la longueur d'onde, c'est-à-dire à l'approximation de l'optique géométrique.

Dans les domaines où $E < U$ les formules trouvées seront analogues aux précédentes, mais la fonction d'onde devient non périodique.

La question de convergence de la série (8) que la méthode Brillouin-Wentzel introduit, n'est pas facile. Même il y a souvent des cas où elle est fortement divergente. Au voisinage des points, où $E = U$, la valeur de Ψ d'après (10) augmente indéfiniment. Donc pour appliquer la formule (10) il est nécessaire d'exclure les régions autour de ces points.

Dans la méthode de Kramers [7] on cherche une solution approchée de (6) de la forme $\Psi = g(x) \cos f(x)$ dans un intervalle (x_1, x_2) . On exige la condition $f(x_2) - f(x_1) \approx n\pi$, n étant le nombre quantique. $g(x)$ est une fonction continue. On arrive à une formule qui représente la partie réelle de (10). Les valeurs propres de (6) sont cherchées à l'aide de la condition de l'ancienne théorie des quanta, que l'intégrale de phase est égale à $n \frac{h}{2\pi}$.

On peut chercher l'intégrale de l'équation de Schrödinger pour plusieurs corpuscules par des approximations successives [5], mais déjà la première approximation que l'on trouve représente l'équation de Jacobi pour plusieurs corpuscules, et l'intégrale de cette dernière équation n'est pas connue en général.

3. Barrières de potentiel.

Quand l'onde Ψ , associée au corpuscule, traverse une surface S , sur laquelle le potentiel subit une discontinuité finie, Ψ reste continue, aussi bien que sa dérivée première suivant la normale de S [3]. Cette propriété est d'une grande importance pour le problème de passage des corpuscules à travers une barrière de potentiel.

Le problème le plus simple de discontinuité de potentiel se pose dans le cas où un plan sépare deux milieux homogènes, de potentiel constant U_1 et U_2 . Si une onde plane monochromatique, se mouvant dans le premier milieu, tombe sur ce plan, elle en est partiellement réfléchie, et pénètre en partie dans le second milieu. On cherche à déterminer l'amplitude de l'onde réfléchie et celle de l'onde transmise, pour connaître les intensités correspondant à ces ondes.

Barrière rectangulaire. — On a à effectuer des opérations semblables aux précédentes dans le problème de passage des corpuscules à travers une barrière de potentiel. Considérons un milieu, où règne un potentiel constant U . Des deux côtés de ce milieu le potentiel est nul. Prenons l'axe des x pour la normale des plans parallèles et admettons que $U < E$. L'onde plane qui se propage suivant x positif, tombe normalement sur la paroi gauche de la barrière. Une partie de cette onde se réfléchit, une autre pénètre dans la barrière. Plusieurs réflexions se produiront dans la barrière, et quand le phénomène devient stationnaire, on aura à gauche de la barrière une onde incidente Ψ_i et une réfléchie Ψ_r , d'amplitudes correspondantes A et B , deux ondes d'amplitudes C et D , se propageant respectivement à gauche et à droite à l'intérieur de la barrière, et une onde Ψ_t , d'amplitude E , à sa droite. Maintenant le problème fondamental est de trouver les

amplitudes B et E, puisque $|B|^2/|A|^2 = R$ mesure le nombre de corpuscules réfléchis (coefficient de réflexion), et $|E|^2/|A|^2 = T$, le nombre de corpuscules transmis (coefficient de transmission).

Comme nous l'avons déjà mentionné, l'onde qui traverse une surface de discontinuité de potentiel reste continue, ainsi que sa dérivée suivant la normale. On doit donc écrire les conditions de continuité sur les deux plans parallèles. On aura quatre équations linéaires par rapport à A, B, C, D, E. En les résolvant, on trouve facilement [3] les valeurs de B et de E, et enfin R et T :

$$(12) \quad R = \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2 k_2 l}{4k_1^2 k_2^2 \cos^2 k_2 l + (k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}.$$

$$(12') \quad \left\{ \begin{aligned} T &= \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 \cos^2 k_2 l + (k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{U^2}{4E(E-U)} \sin^2 \left[\frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(E-U)} l \right]} \end{aligned} \right.$$

où :

$$k_1 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} \quad \text{et} \quad k_2 = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m(E-U)}.$$

Si $U > E$, on aura pour R et T des formules, semblables à (12) et (12').

Les formules (12) et (12') montrent que le nombre des corpuscules transmis T est une fonction de la longueur l de la barrière et de l'énergie E. Si l est constant et E varie, T est fonction de E, qui passe par des maximums successifs de valeur commune $T = 1$ pour une série E_n de valeurs de E. A toute E_n correspond une longueur d'onde λ_n d'une onde, qui traverse complètement la barrière. Ce choix de l'onde est une sorte de résonance, que nous verrons se manifester toujours dans les problèmes de barrières.

Barrière triangulaire. — Pour la barrière rectangulaire la fonction U est constante, et la solution de l'équation d'onde

est très simple. Le cas plus compliqué, où U est fonction linéaire de x , a été étudié par Fowler et Nordheim [8]. Avec un choix convenable de l'origine des coordonnées O , on a : $U = 0$ pour $x \leq 0$ et $U = C - Fx$ pour $x > 0$ (F et C sont des constantes). C'est une barrière en forme d'un triangle rectangle. A l'intérieur de la barrière l'équation d'onde est :

$$(13) \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - C + Fx]\Psi = 0.$$

L'intégrale de (13) s'exprime par les fonctions de Bessel $J_{\frac{1}{3}}$ et $J_{-\frac{1}{3}}$. En écrivant les conditions de continuité sur les deux limites de la barrière, on arrive après des calculs assez longs à la valeur suivante du coefficient de transmission T :

$$(14) \quad T = \frac{4[E(C-E)]^{\frac{1}{2}}}{C} e^{-\frac{8\pi}{h} \frac{\sqrt{2m}(C-E)^{\frac{3}{2}}}{3F}}.$$

Si l'on calcule maintenant T , en se servant de la fonction d'onde approchée (10), on trouve [3] que la valeur principale de T est donnée par le facteur exponentiel, qui figure en (14).

Quand nous avons discuté le domaine de validité de la formule (10), nous avons vu qu'elle n'était sûrement pas valable dans un domaine, qui contient des points pour lesquels $E = U$, puisque Ψ devient infinie dans ces points. Pourtant on vérifie dans beaucoup de cas, comme dans le précédent, que la valeur de T , calculée d'après la formule approchée (10) de la méthode de Brillouin-Wentzel donne le gros du phénomène. Malgré que Ψ d'après (10) soit discontinue dans un intervalle, son application pour le calcul de T donne de bons résultats. Nous verrons plus tard l'explication de ce fait, quand nous trouverons d'une autre manière la solution de l'équation d'onde.

Oscillateur harmonique. — L'oscillateur harmonique est formé par un point matériel de masse m , attiré par le point O

par une force kx , proportionnelle à sa distance x à l'origine, $k = 4\pi^2\nu^2 m$, ν est la fréquence. Son équation est :

$$(15) \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E - \frac{k}{2} x^2 \right) \Psi = 0.$$

On trouve [1, 3] que si $E = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu$, ($n = 0, 1, 2, \dots$) une des deux solutions indépendantes de (15) représente une fonction propre. Si E n'est pas de la forme indiquée, (15) n'a pas de solutions propres.

Considérons maintenant une barrière, où le potentiel a la forme parabolique $U = \frac{k}{2} x^2$ dans un intervalle ($x = -l$, $x = l$), et nul en dehors de cet intervalle. Si une onde plane monochromatique tombe sur la barrière, on peut refaire les calculs habituels pour une barrière, et trouver le coefficient de transparence T . Si $E \neq \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu$, on trouve :

$$(16) \quad T = \frac{16\mu^2}{\beta^2(1 + \mu^2)^2} e^{2\lambda} e^{-4\gamma l^2}; \quad \mu = \frac{k}{2\gamma l}, \quad \gamma = 2\sqrt{\frac{km}{h}}, \quad \lambda = \frac{2E}{h\nu}.$$

Si $E = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu$, on trouve également :

$$(17) \quad T = \frac{4\mu^2}{(1 + \mu^2)^2} = 4 \frac{E/U_m}{(1 + E/U_m)^2}; \quad U_m = \frac{kl^2}{2}.$$

Donc quand l'énergie des corpuscules incidents coïncide avec l'une des valeurs propres de l'oscillateur harmonique, le nombre des corpuscules transmis est beaucoup plus grand que dans le cas où $E \neq \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu$. C'est toujours un phénomène de résonance.

CHAPITRE II

1. Décomposition d'une barrière de potentiel en barrières élémentaires [9].

Nous avons exposé dans le chapitre précédent quelques résultats essentiels des problèmes des barrières de potentiel en Mécanique ondulatoire. Certains points ont été développés plus en détail en vue des applications que nous en ferons dans la suite.

Comme nous l'avons déjà mentionné, plusieurs problèmes sur le passage des corpuscules à travers une barrière quelconque peuvent être résolus assez approximativement en remplaçant la barrière donnée de forme générale par une barrière de forme simple, où les calculs sont faciles à effectuer. Il est très naturel de se poser le problème d'une suite de barrières de forme simple et surtout rectangulaire. On ne peut guère réaliser en pratique une suite de barrières de telle forme, mais le problème quand on considère ladite suite au lieu d'une barrière de forme générale peut présenter quelque intérêt par les solutions approximatives qu'il permet d'obtenir. Si l'on a affaire à un nombre limité de barrières rectangulaires, on répète autant de fois qu'il y a de barrières les calculs faits pour une barrière rectangulaire. Mais si ce nombre est grand, les calculs deviennent très longs et impraticables. On peut, pourtant, faire des simplifications et trouver des formules maniables quand on peut effectuer des passages à la limite. C'est ce que nous allons étudier.

Nous nous occuperons du problème de passage des cor-

puscules à travers une barrière de forme quelconque, en commençant par le problème le plus simple — celui de la propagation des corpuscules suivant une ligne droite OX .

La barrière s'étend par exemple de x_0 à x' . La courbe potentielle qui limite la barrière est donnée par son équation $U=U(x)$ et l'équation d'onde des corpuscules entre x_0 et x' sera :

$$(1) \quad \frac{a^2 \Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - U(x)] \Psi = 0.$$

Nous admettons que $U(x)$ est continue, bornée et possède une dérivée première pour toute valeur de x entre x_0 et x' , ou que U est composée d'un nombre fini d'arcs de courbes, qui ont les propriétés énumérées.

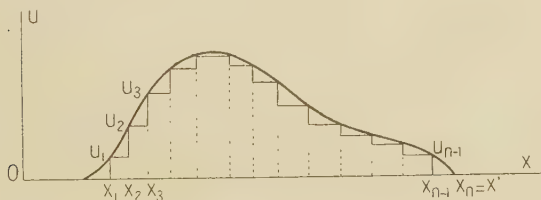


Fig. 1.

Divisons l'intervalle $x_0 x'$ en n parties (n est un entier quelconque) avec les points de division d'abscisses $x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n = x'$. Par ces points de division menons les perpendiculaires à OX , qui rencontrent la courbe U en points $U_1, U_2, \dots$. Si maintenant nous menons les lignes horizontales par $U_1, U_2, \dots$ jusqu'à leur rencontre avec les droites perpendiculaires à OX , et passant par $x_2, x_3, \dots$, nous formons une ligne brisée en forme d'escalier, inscrite dans la courbe U . La méthode pour étudier le passage des corpuscules à travers la barrière U consistera à faire l'étude correspondante pour la barrière formée par la ligne brisée, et à faire le passage à la limite $n \rightarrow \infty$.

Supposons que les corpuscules se propagent dans le sens OX en mouvement uniforme. La propagation est représentée par une onde plane monochromatique d'amplitude A_0 :

$$\Psi(x) = A_0 e^{-ikx}, \quad k = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE},$$

où l'on n'a pas écrit le facteur $e^{2\pi i \nu t}$, que l'on doit sous-entendre. E est l'énergie des corpuscules. Le phénomène qui va se produire du point de vue physique, quand l'onde Ψ atteint la barrière et le suivant. Une partie de l'onde se réfléchit sur la première barrière élémentaire de base $x_2 - x_1$ et de hauteur $U(x_1)$. l'autre partie pénètre dans la barrière. A son tour elle se réfléchit en partie sur la deuxième barrière élémentaire, et pénètre en partie dans cette dernière, et ainsi de suite. Effectivement dans chaque barrière on aura un groupe d'onde, qui se propage suivant OX, et un autre groupe qui se propage dans le sens contraire. Le résultat sera que dans chaque barrière on aura une onde se propageant à droite, et une autre, à gauche. Ces deux dernières ondes auraient une forme compliquée si les bases des barrières $x_i - x_{i-1}$ auraient des longueurs finies, mais $x_i - x_{i-1}$ étant petits, on peut regarder l'ensemble des portions de ces ondes dans la barrière élémentaire $x_i - x_{i-1}$ comme formant deux parties d'une onde plane monochromatique se propageant à droite, et d'une autre se propageant à gauche. Physiquement on peut dire que dans chaque petite barrière on a une certaine probabilité de trouver des corpuscules se propageant à gauche ou à droite. Du point de vue purement mathématique on peut dire que l'équation de Schrödinger, qui décrit le mouvement des corpuscules, admet dans chaque barrière élémentaire une solution Ψ , qui est une combinaison linéaire de deux ondes planes monochromatiques, qui se propagent respectivement à gauche et à droite. Si $U(x_j)$ est la valeur de l'énergie potentielle dans la barrière de base

$x_{j+1} - x_j$, l'équation d'onde, valable dans l'intervalle (x_j, x_{j+1}) est :

$$(1') \quad \frac{d^2 \Psi_j}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} [E - U(x_j)] \Psi_j = 0$$

et sa solution complète valable pour des valeurs de x entre x_j et x_{j+1} .

$$(2) \quad \Psi_j(x) = A_j e^{-iy_j x} + B_j e^{iy_j x} \quad (j = 1, 2, \dots, n-1)$$

avec :

$$(2') \quad y_j = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2m[E - U(x_j)]}.$$

Si $E > U_j$, on aura comme solution une vraie onde, si $E < U_j$, on n'aura pas, à proprement parler, une onde, mais une fonction réelle non périodique. Cependant cela n'affecte point les raisonnements qui suivent. Nous avons déjà vu (p. 8) que l'onde Ψ et sa dérivée doivent être continues sur les limites de la barrière traversée par l'onde Ψ . Dans notre cas cela doit être vrai sur toute limite commune de deux barrières voisines. On aura donc des conditions de continuité, que l'on écrira par exemple pour $x = x_j$:

$$(3) \quad \Psi_j(x_{j+1}) = \Psi_{j+1}(x_{j+1}), \quad \left(\frac{d\Psi_j}{dx} \right)_{x_{j+1}} = \left(\frac{d\Psi_{j+1}}{dx} \right)_{x_{j+1}}$$

ou en forme explicite (en supprimant le facteur i dans la deuxième équation) :

$$(4) \quad \begin{cases} A_j e^{-iy_j x_{j+1}} + B_j e^{iy_j x_{j+1}} = A_{j+1} e^{-iy_{j+1} x_{j+1}} + B_{j+1} e^{iy_{j+1} x_{j+1}} \\ y_j (A_j e^{-iy_j x_{j+1}} - B_j e^{iy_j x_{j+1}}) = y_{j+1} (A_{j+1} e^{-iy_{j+1} x_{j+1}} - B_{j+1} e^{iy_{j+1} x_{j+1}}) \end{cases} \\ (j = 0, 1, 2, \dots, n-2)$$

$$(5) \quad \begin{cases} A_{n-1} e^{-iy_{n-1} x_n} + B_{n-1} e^{iy_{n-1} x_n} = C e^{-iy_0 x_n} \\ y_{n-1} (A_{n-1} e^{-iy_{n-1} x_n} - B_{n-1} e^{iy_{n-1} x_n}) = y_0 C e^{-iy_0 x_n} \end{cases}$$

L'amplitude de l'onde transmise est indiquée par C , celle de l'onde réfléchie, par B_0 .

Puisque la barrière se compose de $n - 1$ barrières successives, on a $2n$ conditions comme (4) et (5), qui permettront d'éliminer les amplitudes A_j, B_j ($j = 1, 2, \dots, n - 1$), et de trouver B_0 et C en fonction de l'amplitude A_0 , qui est arbitraire (Les systèmes (4) et (5) contiennent $2n$ équations entre les $2n + 1$ grandeurs A_j, B_j ($j = 0, 1, \dots, n - 1$) et C). Pour effectuer ces éliminations, on peut procéder comme il suit. Le système (4) pris pour la valeur $j = 0$ de l'indice, détermine A_1, B_1 en fonction de A_0, B_0 . On met les valeurs de $A_1 B_1$ dans les deux équations de (4) pour $j = 1$, et l'on a deux relations entre A_0, B_0 et A_2, B_2 , d'où l'on tire A_2, B_2 en fonction de A_0, B_0 , etc. Donc en éliminant toutes les amplitudes A_j, B_j ($j = 1, 2, \dots, n - 1$), on trouvera deux relations entre A_0, B_0 et C , qui donneront les formules cherchées, exprimant B_0 et C comme fonctions connues de A_0 .

Les équations (4) sont linéaires et non homogènes par rapport à A_{j+1}, B_{j+1} . Le déterminant D_{j+1} de leurs coefficients est :

$$(6) \quad \left\{ \begin{aligned} D_{j+1} &= \begin{vmatrix} e^{-iy_{j+1}x_{j+1}} & e^{iy_{j+1}x_{j+1}} \\ y_{j+1}e^{-iy_{j+1}x_{j+1}} & -y_{j+1}e^{iy_{j+1}x_{j+1}} \end{vmatrix} \\ &= y_{j+1} \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{vmatrix} = -2y_{j+1}. \end{aligned} \right.$$

D'après la théorie des équations linéaires, on trouve :

$$(7) \quad \left\{ \begin{aligned} A_{j+1} &= \frac{1}{D_{j+1}} \begin{vmatrix} A_j e^{-iy_j x_{j+1}} + B_j e^{iy_j x_{j+1}} & e^{iy_{j+1} x_{j+1}} \\ A_j y_j e^{-iy_j x_{j+1}} - B_j y_j e^{iy_j x_{j+1}} & -y_{j+1} e^{iy_{j+1} x_{j+1}} \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{2y_{j+1}} e^{i(y_{j+1}-y_j)x_{j+1}} (y_{j+1} + y_j) A_j \\ &\quad + \frac{1}{2y_{j+1}} e^{i(y_{j+1}+y_j)x_{j+1}} (y_{j+1} - y_j) B_j \end{aligned} \right.$$

et de même :

$$(8) \quad B_{j+1} = \frac{y_{j+1} - y_j}{2y_{j+1}} e^{-i(y_{j+1}+y_j)x_{j+1}} A_j + \frac{y_{j+1} + y_j}{2y_{j+1}} e^{-i(y_{j+1}-y_j)x_{j+1}} B_j.$$

Il est clair, d'après (6), qu'aux points pour lesquels

$U(x) = E$, donc $D_{j+1} = 0$, cette méthode ne s'applique pas directement et l'on doit y faire des considérations spéciales.

Il est commode maintenant d'introduire les notations et le langage vectoriels, c'est-à-dire que nous considérerons les amplitudes A_j, B_j comme les deux composantes d'un vecteur $\vec{a}_j$. Donc les relations (4) lient les composantes du vecteur $\vec{a}_j$ à celles du vecteur $\vec{a}_{j+1}$. Les relations (7) et (8) permettent de passer du vecteur $\vec{a}_j$ au vecteur $\vec{a}_{j+1}$. Comme on le sait, ce passage peut être effectué à l'aide d'une matrice à deux lignes et à deux colonnes, en considérant les composantes du vecteur comme une matrice à deux lignes et à une colonne.

Avec ce langage, on peut remplacer les deux relations (7) et (8) par la suivante :

$$(9) \quad \begin{vmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{vmatrix} = |M_j| \begin{vmatrix} A_j \\ B_j \end{vmatrix}$$

ou encore :

$$(10) \quad \vec{a}_{j+1} = M_j \vec{a}_j \quad (j = 0, 1, 2, \dots, n-1)$$

M_j étant la matrice suivante :

$$(11) \quad M_j = \begin{vmatrix} e^{i(y_{j+1}-y_j)x_{j+1}} \frac{y_{j+1}+y_j}{2y_{j+1}} & e^{i(y_{j+1}+y_j)x_{j+1}} \frac{y_{j+1}-y_j}{2y_{j+1}} \\ e^{-i(y_{j+1}+y_j)x_{j+1}} \frac{y_{j+1}-y_j}{2y_{j+1}} & e^{-i(y_{j+1}-y_j)x_{j+1}} \frac{y_{j+1}+y_j}{2y_{j+1}} \end{vmatrix}$$

D'après la formule (10) la matrice M_j transforme le vecteur $\vec{a}_j$ en vecteur $\vec{a}_{j+1}$. De la même manière on transformera le vecteur $\vec{a}_{j+1}$ en $\vec{a}_{j+2}$ à l'aide de la matrice M_{j+1} , dont la différence avec M_j est que dans cette dernière l'indice j est remplacé par $j+1$. En effectuant p éliminations successives, on arrivera à la relation vectorielle :

$$\vec{a}_{j+p} = M_{j+p} M_{j+p-1} \dots M_{j+1} \vec{a}_j.$$

Mais si l'on commence les éliminations de $j = 0$ à $p = n$, on aura :

$$(12) \quad \vec{a}_n = M \vec{a}_0$$

$$(12') \quad M = M_n M_{n-1} \dots M_1 M_0$$

M est une matrice à deux lignes et à deux colonnes, qu'il s'agit de calculer. Les éléments $m_{11} \dots m_{22}$ de la matrice M connus, le problème du passage des corpuscules devient un problème algébrique simple. Les amplitudes cherchées B_0 et C seront données par les deux relations linéaires, résultant de l'égalité vectorielle :

$$(13) \quad \begin{vmatrix} C \\ C \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} A_0 \\ B_0 \end{vmatrix}$$

Nous avons divisé la base de la barrière donnée et la barrière elle-même à n parties. Si n est assez grand, les bases des barrières élémentaires sont très petites, et aussi la différence entre les hauteurs de chacune des deux barrières voisines. Nous indiquerons :

$$(14) \quad x_{j+1} - x_j = \Delta x_j, \quad y_{j+1} - y_j = \left(\frac{dy}{dx} \right)_{x_j} \Delta x_j = \Delta y_j.$$

Les différences Δy_j sont parfaitement déterminées avec les hypothèses sur la fonction $U(x)$ dans l'intervalle $(x_0 x')$. On peut donner une autre forme à M_j en remplaçant dans ces termes y_{j+1} par $y_j + \Delta y_j$, et x_{j+1} par $x_j + \Delta x_j$. Puisque les Δy_j sont très petits, nous ne garderons que les termes de premier ordre par rapport à Δy_j dans les éléments de la matrice M_j . Par exemple le terme $(m_j)_{11}$ de la matrice M_j sera :

$$(15) \quad \left\{ \begin{aligned} (m_j)_{11} &= e^{i \Delta y_j x_j} \frac{2y_j + \Delta y_j}{2(y_j + \Delta y_j)} = e^{i x_j \Delta y_j} \left(1 + \frac{\Delta y_j}{2y_j} \right) \left(1 - \frac{\Delta y_j}{y_j} \right) \\ &= e^{i x_j \Delta y_j} \left(1 - \frac{\Delta y_j}{2y_j} \right) = e^{i x_j \Delta y_j - \frac{\Delta y_j}{2y_j}} \end{aligned} \right.$$

De la même manière on trouve, toujours en s'arrêtant aux infiniment petits de premier ordre :

$$(15') \quad \left\{ \begin{array}{l} (m_j)_{12} = e^{i(2y_j + \Delta y_j)(x_j + \Delta x_j)} \frac{\Delta y_j}{2(y_j + \Delta y_j)} = \frac{\Delta y_j}{2y_j} e^{2iy_j x_j} \\ (m_j)_{21} = \frac{\Delta y_j}{2y_j} e^{-2iy_j x_j}, \quad (m_j)_{22} = e^{-ix_j \Delta y_j - \frac{\Delta y_j}{2y_j}}, \end{array} \right.$$

et la matrice M_j s'écrit :

$$(16) \quad M_j = \begin{vmatrix} e^{ix_j \Delta y_j - \frac{\Delta y_j}{2y_j}} & \frac{\Delta y_j}{2y_j} e^{2ix_j y_j} \\ \frac{\Delta y_j}{2y_j} e^{-2iy_j x_j} & e^{-ix_j y_j - \frac{\Delta y_j}{2y_j}} \end{vmatrix}$$

Quand Δy_k sont très petits, les éléments de la diagonale principale $(m_j)_{11}$ et $(m_j)_{22}$ ont des valeurs qui ne diffèrent pas beaucoup de l'unité, tandis que $(m_j)_{12}$ et $(m_j)_{21}$ sont très petits. Donc M_j est une matrice presque diagonale, en appelant matrice diagonale la matrice $\| a_{ik} \delta_{ik} \|$, avec a_{ik} quelconque, et :

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = k \\ 0 & \text{si } i \neq k. \end{cases}$$

Afin d'effectuer plus facilement le produit des M_j dans la formule (12'), et de saisir clairement la loi de formation des termes du produit M , nous calculerons la $n^{\text{ième}}$ puissance de la matrice presque diagonale $A = \| a_{ik} \|$ ($i, k = 1, 2$) :

$$(17) \quad A = \begin{vmatrix} 1 + \alpha & \alpha \\ \alpha & 1 + \alpha \end{vmatrix}$$

où α est un nombre positif très petit par rapport à l'unité, $\alpha \ll 1$.

Si l'on a les deux matrices $A = \| a_{ik} \|$ et $B = \| b_{ik} \|$, les éléments c_{ik} de la matrice $C = AB$ sont donnés, comme on le sait, par la formule :

$$c_{ik} = \sum_l a_{il} b_{lk}$$

D'après cette règle on trouve :

$$(18) \quad A^2 = \begin{vmatrix} 1 + 2\alpha + 2\alpha^2 & 2\alpha + 2\alpha^2 \\ 2\alpha + 2\alpha^2 & 1 + 2\alpha + 2\alpha^2 \end{vmatrix} = \parallel (a_2)_{i,k} \parallel.$$

D'après (18) $(a_2)_{11} = (a_2)_{22}$, $(a_2)_{12} = (a_2)_{21}$, et d'autre par le premier terme de $(a_2)_{11}$ est l'unité, le premier terme $(a_2)_{12}$ contient α comme facteur. Toutes ces propriétés restent remplies pour les éléments de chaque puissance de A , puisque, si elles sont valables pour A^n , elles le sont sûrement pour A^{n+1} . On le voit immédiatement en multipliant les colonnes de A^n par les lignes de A pour former A^{n+1} .

Dans les quatre termes de A le coefficient de α est 1, dans les termes de A^2 ce coefficient est 2, c'est-à-dire égal à la puissance de A . Si nous supposons que ce coefficient est égal à n dans les éléments de A^n , donc on peut poser $(a_n)_{11} = 1 + n\alpha + \alpha^2$ (), il est clair qu'il sera égal à $n + 1$ dans les éléments de A^{n+1} . En effet $A^{n+1} = AA^n$, et :

$$(18') \quad (a_{n+1})_{11} = (1 + \alpha)(a_n)_{11} + \alpha(a_n)_{21} = 1 + (n + 1)\alpha + \alpha^2 \text{ ()}.$$

On peut donc écrire que le coefficient de α dans les termes de A_n est égal à $n = C_n^1$.

On procède de même pour le coefficient de α^2 . Ce coefficient est égal à zéro dans les termes de A , et égal à 2 dans les termes de A^2 . Ecrivons aussi le terme $(a_3)_{11}$ de A^3 :

$$\begin{aligned} (a_3)_{11} &= (1 + \alpha)(a_2)_{11} + \alpha(a_2)_{21} \\ &= 1 + 3\alpha + (2 + 2 \cdot 2)\alpha^2 + 4\alpha^3 = 1 + C_3^1\alpha + 2C_3^2\alpha^2 + 4\alpha^3. \end{aligned}$$

Il est facile de vérifier que si la formule de la formation du coefficient de α^2 est vraie pour les termes de A^n , elle l'est aussi pour A^{n+1} . En employant toujours l'induction complète, on trouve que le coefficient de α^k dans A^n est $2^{k-1}C_n^k$, et l'on arrive aux formules :

$$(19) \quad \left\{ \begin{aligned} (a_n)_{11} &= 1 + \sum_{k=1}^n 2^{k-1}C_n^k\alpha^k = (a_n)_{22} \\ (a^n)_{12} &= \sum_{k=1}^n 2^{k-1}C_n^k\alpha^k = (a_n)_{21} \end{aligned} \right.$$

Un raisonnement plus direct nous conduira aux mêmes formules. On a vu plus haut, que le coefficient de α dans A^n était $n = C_n^1$. On peut aussi voir d'après (18') que le coefficient de α^2 dans la matrice A_n est égal à la somme du double du coefficient de α dans les termes de A^{n-1} , donc $2C_n^1$, et du coefficient de α^2 dans les termes de A^{n-1} . Ce dernier coefficient est égal à 2 pour $n = 2$, ou encore égal à $2C_n^0$. Écrivons sur une ligne horizontale les coefficients C_n^1 de α , multipliés par 2, c'est-à-dire 2, 4, 6, ... et les coefficients de α^2 au dessous de cette ligne, en écrivant le premier coefficient 2 au-dessous du nombre 4. Le coefficient suivant de α^2 sera égal à la somme du nombre qui le précède et du nombre écrit au-dessus de ce dernier. Mais c'est exactement la règle de formation des nombres dans le triangle de Pascal :

$$\begin{array}{ccccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \dots \\ & 1 & 3 & 6 & 10 & \dots \\ & & 1 & 4 & 10 & \dots \\ & & & \dots & & \end{array}$$

où les nombres des deux premières lignes sont multipliés par 2. Par conséquent les nombres de la deuxième ligne seront égaux à $2C_n^2$, et ce sont les coefficients de α^2 . On voit de même que les coefficients de α^k sont les nombres de la $k^{\text{ième}}$ ligne du triangle de Pascal, multipliés par 2^{k-1} , et l'on arrive toujours aux formules (19).

Nous nous servirons aussi de la $n^{\text{ième}}$ puissance de la matrice B presque diagonale est plus simple :

$$(20) \quad B = \begin{vmatrix} 1 & \alpha \\ \alpha & 1 \end{vmatrix}$$

Avec des raisonnements semblables aux précédentes on trouve, si n est pair :

$$(21) \quad B_n = \begin{vmatrix} \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}} C_n^{2i} \alpha^{2i} & \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} C_n^{2i+1} \alpha^{2i+1} \\ \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}-1} C_n^{2i+1} \alpha^{2i+1} & \sum_{i=0}^{\frac{n}{2}} C_n^{2i} \alpha^{2i} \end{vmatrix}$$

et si n est impair, l'indice de sommation i varie de 0 à $\frac{n-1}{2}$ dans les éléments de B^n . Si α est un nombre complexe, d'amplitude très petite et de phase quelconque, donc $\alpha = re^{i\varphi}$, il est évident que l'on peut calculer de la même façon A^n , en remplaçant formellement α par $re^{i\varphi}$ dans les éléments de A^n (de même pour B^n).

Nous allons calculer maintenant la matrice $M = M_n M_{n-1} \dots M_0$ de (12'). Afin de simplifier les calculs nous poserons pour les éléments de la matrice M_k (16) (en employant l'indice k au lieu de l'indice j):

$$(22) \quad ix_k \Delta y_k = \alpha_k, \quad 2ix_k y_k = \beta_k, \quad \frac{\Delta y_k}{2y_k} = \rho_k,$$

et M_k s'écrira :

$$(23) \quad M_k = \begin{vmatrix} e^{\alpha_k - \rho_k} & \rho_k e^{\beta_k} \\ \rho_k e^{-\beta_k} & e^{-\alpha_k - \rho_k} \end{vmatrix}$$

ρ_k entre dans les éléments de M_k comme coefficient des exponentielles, et dans les exposants des exponentielles. On peut rapprocher la matrice M_k dans la forme (23) de la matrice B (20). ρ_k comme facteur des exponentielles dans M_k correspond à α dans B . Il est évident que les termes de M_k seront composés des ρ_k , considérés comme des facteurs des exponentielles, exactement de la même façon comme les termes de B sont composés du nombre α , puisque les ρ_k , qui entrent comme des exposants dans les termes de M_k , restent toujours dans les exposants quand on multiplie deux exponentielles. Par conséquent, comme le montre la formule (21), les termes $m_{rs}(r, s = 1, 2)$ de la matrice produit M seront des polynômes par rapport aux ρ_k . Les coefficients de ces polynômes seront des exponentielles, qui contiennent les ρ_k aux exposants. Toujours en comparant M avec B^n (21) on voit que m_{11} et m_{22} seront des polynômes pairs par rapport aux ρ_k , et m_{12} et m_{21} des polynômes impairs.

Multiplions M_k (23) par M_{k+1} d'après la règle de multiplication des matrices On trouve :

$$(24) \quad M_{k+1}M_k = \begin{vmatrix} e^{\alpha_{k+1} + \alpha_k - \rho_{k+1} - \rho_k + \rho_{k+1}\rho_k} e^{\beta_{k+1} - \beta_k} \\ \rho_k e^{\alpha_{k+1} - \rho_{k+1} + \beta_k} + \rho_{k+1} e^{\beta_{k+1} - \alpha_k - \rho_k} \\ \rho_{k+1} e^{-\beta_{k+1} + \alpha_k - \rho_k} + \rho_k e^{-\beta_k - \alpha_{k+1} - \rho_{k+1}} \\ e^{-\alpha_{k+1} - \alpha_k - \rho_{k+1} - \rho_k} + \rho_{k+1}\rho_k e^{-\beta_{k+1} + \beta_k} \end{vmatrix}$$

Nous introduirons une indication qui sera utile dans la suite. Admettons que nous ayons effectué le produit, comme (24), de p matrices successives de genre M_k . Dans les éléments de la matrice produit groupons les termes qui contiennent un facteur ρ_k , ceux à deux facteurs ρ_k , etc .. Nous indiquerons par $m_{11}^{2i,p}$ la somme des éléments de la première ligne et de la première colonne de la matrice produit, qui contiennent $2i$ facteurs ρ_k . (Evidemment $2i \leq p$). On aura encore trois notations, analogues à la précédente, $m_{22}^{2i,p}$, $m_{42}^{2i+1,p}$, $m_{21}^{2i+1,p}$. Par exemple, on peut exprimer avec ces notations deux éléments de la matrice (24) :

$$\begin{aligned} e^{\alpha_{k+1} + \alpha_k - \rho_{k+1} - \rho_k} + \rho_{k+1}\rho_k e^{\beta_{k+1} - \beta_k} &= m_{11}^{0,2} + m_{11}^{2,2} \\ \rho_{k+1} e^{-\beta_{k+1} + \alpha_k - \rho_k} + \rho_k e^{-\beta_k - \alpha_{k+1} - \rho_{k+1}} &= m_{21}^{1,2}. \end{aligned}$$

En multipliant (24) par M_{k+2} , nous trouvons l'élément m_{11} de la première ligne et de la première colonne du produit $M_{k+2}M_{k+1}M_k$:

$$\begin{aligned} m_{11} &= e^{\alpha_{k+2} + \alpha_{k+1} + \alpha_k - \rho_{k+2} - \rho_{k+1} - \rho_k} + \rho_{k+1}\rho_k e^{\alpha_{k+2} - \rho_{k+2} + \beta_{k+1} - \beta_k} \\ &\quad + \rho_{k+2}\rho_{k+1} e^{\alpha_k - \rho_k + \beta_{k+2} - \beta_{k+1}} + \rho_{k+2}\rho_k e^{-\alpha_{k+1} - \rho_{k+1} + \beta_{k+2} - \beta_k} \\ &= m_{11}^{0,3} + m_{11}^{2,3}. \end{aligned}$$

Le premier élément de la dernière somme est $m_{11}^{0,3}$ que l'on peut écrire $m_{11}^{0,3} = e^{\sum_{j=0}^2 \alpha_{k+j} - \sum_{j=0}^2 \rho_{k+j}}$. L'élément $m_{11}^{0,4}$ aura la même forme, mais les sommes de l'exposant auront un terme de plus. Toujours d'après l'induction mathématique

complète, qui s'applique immédiatement dans ce cas, on voit que l'élément $m_{11}^{0,p}$ dans la matrice $M_{p-1}M_{p-2} \dots M_2M_1$ sera :

$$m_{11}^{0,p} = e^{\sum_{j=0}^{p-1} \alpha_{k+j} - \sum_{j=0}^{p-1} \rho_{k+j}}.$$

A l'aide des notations (22) on donnera la forme explicite de $m_{11}^{0,p}$. L'exposant prend d'abord la forme :

$$(24) \quad \sum_{j=0}^{p-1} \alpha_{k+j} - \sum_{j=0}^{p-1} \rho_{k+j} = i \sum_{j=0}^{p-1} x_{k+j} \Delta y_{k+j} - \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{p-1} \frac{\Delta y_{k+j}}{y_{k+j}}.$$

Nous avons divisé l'intervalle x_0x' (la base de la barrière) en n parties. Si n est très grand, donc chaque intervalle très petit, les sommes précédentes deviennent des intégrales définies. Dans les formules qui suivent les intégrations sont indiquées par rapport à y , mais on peut les écrire immédiatement par rapport à x , puisque y est fonction connue (2') de x , et $dy = \frac{dy}{dx} dx$. Pour l'instant nous ne nous occupons pas de la question de convergence des intégrales, qui sera discutée plus tard.

En passant à la limite $p \rightarrow \infty$, la partie droite de la dernière égalité s'écrira :

$$(24') \quad \left\{ \begin{aligned} i \int_{y_k}^{y_p} x dy - \frac{1}{2} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{y} &= i \int_{y_k}^{y_p} x dy - \lg \sqrt{\frac{y_p}{y_k}} \\ &= i(x_p y_p - x_k y_k) - i \int_{x_k}^{x_p} y dx - \lg \sqrt{\frac{y_p}{y_k}} \end{aligned} \right.$$

donc $m_{11}^{0,p}$ deviendra à l'aide de (2) :

$$(25) \quad \left\{ \begin{aligned} m_{11}^{0,p} &= \sqrt{\frac{y_k}{y_p}} e^{i \int_{y_k}^{y_p} x dy} \\ &= \sqrt{\frac{E - U(x_k)}{E - U(x_p)}} e^{i(x_p y_p - x_k y_k) - i[\Phi(x_p) - \Phi(x_k)]} \end{aligned} \right.$$

où l'on a posé :

$$(24'') \quad \int^x y dx = \Phi(x)$$

qui n'est autre chose que l'intégrale classique de Maupertuis.

Si nous fixons la valeur de x_k , l'intégrale dans $m_{11}^{0,p}$ est fonction de sa limite supérieure, donc on peut considérer $m_{11}^{0,p}$ comme fonction connue de x_p , c'est à dire de x . Quand le passage à la limite est fait, nous indiquerons cette fonction par $m_{11}^0(x)$ ou m_{11}^0 tout simplement.

D'après (23) on voit que l'élément m_{22} de la matrice M_k ne se distingue de m_{11} que par le signe de α_k dans l'exposant. En tenant compte de cela, répétons les raisonnements de formation de m_{11}^0 dans la matrice M . Sans peine on constate que m_{22}^0 ne se distingue de m_{11}^0 que par le signe de l'exposant, à savoir :

$$(25') \quad \left\{ \begin{aligned} m_{22}^{0,p} &= \sqrt{\frac{y_k}{y_p}} e^{-i \int_{y_k}^{y_p} x dy} \\ &= \sqrt{\frac{E - U(x_k)}{E - U(x_p)}} e^{-i(x_p y_p - x_k y_k) + i \int_{x_k}^{x_p} y dx} \end{aligned} \right.$$

Nous avons mentionné plus haut que les éléments m_{12} et m_{21} de M , comme les éléments correspondant de la matrice $B^n(21)$ sont des polynômes impairs de p . Calculons m_{12}^1 , le premier terme de m_{12} . En effectuant les produits, comme plus haut, de proche en proche on trouve :

$$(26) \quad m_{12}^{1,p} = \sum_{j=0}^{p-1} \rho_{k+j} e^{\beta_{k+j} - \sum_{l=0}^{j-1} \alpha_{k+l} + \sum_{l=j+1}^{p-1} \alpha_{k+l} - \sum_{l=0}^{p-l} \rho_{k+l}}.$$

On vérifie immédiatement cette relation pour $p=3$. On voit aussi facilement qu'elle est valable pour une valeur $p=n$ si elle est exacte pour $p=n-1$. Quand $p \rightarrow \infty$, les sommes deviennent des intégrales, et l'on a :

$$(26') \quad \left\{ \begin{aligned} m_{12}^{1,p}(x_p) &= \frac{1}{2} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{y} e^{2ixy - i \int_{y_k}^y x dy + i \int_y^{y_p} x dy - \frac{1}{2} \int_{y_k}^{y_p} \frac{y dy}{y}} \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E - U(x_k)}{E - U(x_p)}} e^{i(x_k y_k + x_p y_p)} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{y} e^{i \int_{x_k}^x y dx - i \int_x^{x_p} y dx} \end{aligned} \right.$$

De la même manière on peut trouver tous les termes des polynômes qui forment les éléments de la matrice M . Mais cette méthode est longue et pénible. Nous trouverons des formules de récurrence qui permettront d'écrire tous les termes des polynômes.

Formons le produit de p matrices :

$$M_{k+p} M_{k+p-1} \dots M_{k+1} M_k = M.$$

Comme il a été déjà expliqué, $m_{11}^{2i,p}$ est le terme de la première ligne et de la première colonne de cette matrice M , terme qui contient $2i$ facteurs ρ . Multiplions de gauche ce produit par la matrice M_{k+p+1} . $m_{11}^{2i,p+1}$, terme de la première ligne et de la première colonne de la matrice produit de $p+1$ facteurs, contient $2i$ facteurs ρ . Ce terme sera, d'après la règle de multiplication de matrices, la somme de ce terme de la première ligne et de la première colonne de la matrice précédente M , qui contient $2i$ facteurs ρ , multiplié par $e^{\alpha_{k+p+1} - \rho_{k+p+1}}$, et du terme de la deuxième ligne et de la première colonne de la même matrice M , qui contient $2i-1$ facteurs ρ , multiplié par ρ_{k+p+1} , $e^{\beta_{k+p+1}}$. Ce qui peut s'écrire :

$$(27) \quad m_{11}^{2i,p+1} = e^{\alpha_{k+p+1} - \rho_{k+p+1}} m_{11}^{2i,p} + \rho_{k+p+1} e^{\beta_{k+p+1}} m_{21}^{2i-1,p}.$$

Des raisonnements tout à fait analogues aux précédents donneront encore trois formules de récurrence.

$$(27') \quad \begin{cases} m_{12}^{2i+1,p+1} = e^{\alpha_{k+p+1} - \rho_{k+p+1}} m_{12}^{2i+1,p} + \rho_{k+p+1} e^{\beta_{k+p+1}} m_{22}^{2i,p} \\ m_{21}^{2i+1,p+1} = \rho_{k+p+1} e^{-\beta_{k+p+1}} m_{11}^{2i,p} + e^{-\alpha_{k+p+1} - \rho_{k+p+1}} m_{21}^{2i+1,p} \\ m_{22}^{2i,p+1} = \rho_{k+p+1} e^{-\beta_{k+p+1}} m_{12}^{2i-1,p} + e^{-\alpha_{k+p+1} - \rho_{k+p+1}} m_{22}^{2i,p} \end{cases}$$

A l'aide de ces formules nous expliciterons les termes de la matrice M . Commençons par $m_{11}^{2i,p+1}$. D'après (27) ce terme est exprimé par $m_{11}^{2i,p}$, donc l'indice en haut et à droite est diminué d'une unité. Si nous exprimons le terme $m_{11}^{2i,p}$ de la partie droite de (27) par $m_{11}^{2i,p-1}$ à l'aide de la même formule (27), nous trouverons :

$$m_{11}^{2i,p+1} = \rho_{k+p+1} e^{\beta_{k+p+1}} m_{21}^{2i-1,p} \\ + e^{\alpha_{k+p+1} - \rho_{k+p+1}} (\rho_{k+p} e^{\beta_{k+p}} m_{21}^{2i-1,p-1} + e^{\alpha_{k+p} - \rho_{k+p}} m_{11}^{2i,p-1}).$$

Nous pouvons maintenant remplacer $m_{11}^{2i,p-1}$ de la dernière égalité par $m_{11}^{2i,p-2}$ à l'aide de (27), ce dernier terme par $m_{11}^{2i+1,p-3}$ et ainsi de suite. Nous arriverons ainsi jusqu'au terme $m_{11}^{2i,2i}$. La partie droite de (27) sera une somme par rapport à ρ . On trouve, sans peine, en tenant compte de la loi de formation de la dernière égalité :

$$m_{11}^{2i,p+1} = \rho_{k+p+1} e^{\beta_{k+p+1}} m_{21}^{2i-1,p} \\ + \sum_{l=2i}^p \rho_{k+l} e^{\beta_{k+l} + \sum_{j=l+1}^{p+1} (\alpha_{k+j} - \rho_{k+j})} m_{21}^{2i-1,l}.$$

Remplaçons dans la dernière formule ρ , α , β par leurs valeurs prises de (22) et faisons le passage à la limite $p \rightarrow \infty$. Le premier terme de la partie droite de la dernière égalité ne peut pas être commodément présenté comme un terme de la somme. On peut le négliger, puisqu'il tend vers zéro en même temps que ρ . Le terme $m_{21}^{2i,l}$ de la somme dépend de l'indice l , donc il est une fonction de y_l , c'est-à-dire de y , quand les intervalles tendent vers zéro. Cette fonction sera indiquée par $m_{11}^{2i}(y)$. On trouve pour $m_{11}^{2i,p+1}$, en tenant compte de (27) et (27') :

$$(28) \left\{ \begin{aligned} m_{11}^{2i}(y_p) &= \frac{1}{2} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{y} e^{2ixy + i \int_y^{y_p} \xi d\tau} - \frac{1}{2} \int_y^{y_p} \frac{dy}{y} m_{21}^{2i-1}(y) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{y_p}} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{\sqrt{y}} e^{2ixy + i \int_y^{y_k} \xi d\tau} m_{21}^{2i-1}(y) \end{aligned} \right.$$

où ξ et τ remplacent formellement les variables x et y .

A l'aide de (24') et (24'') on peut donner à $m_{11}^{2i}(y_p)$ la forme :

$$(28') \quad m_{11}^{2i}(y_p) = \frac{e^{ixpy_p - i\Phi(y_p)}}{2\sqrt{y_p}} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{\sqrt{y}} e^{ixy - i\Phi(y)} m_{21}^{2i-1}(y).$$

Le terme $m_{11}^{2i}(y_p)$ sera une fonction connue de y , si l'on connaît $m_{21}^{2i-1}(y)$ comme fonction de y .

Preons la deuxième formule (27'). Si nous appliquons la même formule sur le terme $m_{21}^{2i+1,p}$ de la partie droite, et abaissons successivement l'indice p comme pour le terme $m_{21}^{2i+1,p+1}$, nous arriverons à la formule :

$$m_{21}^{2i+1,p+1} = \sum_{l=2i}^{p+1} \rho_{k+l} e^{-\beta_{k+l} - \sum_{j=l+1}^{p+1} (\alpha_{k+j} - \rho_{k+j})} m_{11}^{2i,l}.$$

et avec le passage à la limite :

$$(29) \quad m_{21}^{2i+1}(y_p) = \frac{1}{2\sqrt{y_p}} \int_{y_k}^{y_p} \frac{e^{-2ixy - i \int_y^{y_p} \xi d\eta}}{\sqrt{y}} m_{11}^{2i}(y) dy.$$

Dans la formule (28) on peut remplacer $m_{21}^{i1-2}(y)$ par le même terme, pris de (29). On trouve :

$$(31) \quad \left\{ \begin{aligned} m_{11}^{2i}(y_p) &= \frac{1}{2^2 y_p} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{\sqrt{y}} e^{2ixy + i \int_y^{y_p} \xi d\eta} \\ &\quad \int_{y_k}^y \frac{e^{-2ix_1 y_1 - i \int_{y_1}^y \xi_1 d\eta_1}}{\sqrt{y_1}} m_{11}^{2i-2}(y_1) dy_1. \end{aligned} \right.$$

On peut continuer le même procédé sur m_{21}^{i1-2} , pour abaisser son indice en haut et à droite jusqu'à zéro, c'est-à-dire arriver au terme m_{11}^0 , qui est connu d'après (25). La forme finale de $m_{11}^{2i}(y)$ sera :

$$(32) \quad \left\{ \begin{aligned} m_{11}^{2i}(y_p) &= \frac{1}{2^{2i} y_p^i} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dx}{\sqrt{y}} e^{2ixy + i \int_y^{y_p} \xi d\eta} \\ &\quad \int_{y_k}^y \frac{dy_1}{\sqrt{y_1}} e^{-2ix_1 y_1 - i \int_{y_1}^y \xi d\eta} \int_{y_k}^{y_1} \dots \\ &\quad \int_{y_k}^{y_{2i-2}} \frac{dy_{2i-1}}{\sqrt{y_{2i-1}}} e^{-2ix_{2i-1} y_{2i-1} - i \int_{y_{2i-1}}^{y_{2i-2}} \xi_{2i-1} d\eta_{2i-1}} m_{11}^0(y_{2i-1}) \end{aligned} \right.$$

(on ne doit pas confondre l'indice i du terme avec l'unité imaginaire i).

Il est clair que dans la dernière formule les variables avec des indices remplacent formellement les variables x et y , et les intégrales sont des fonctions de leur limite supérieure.

La dernière formule exprime $m_{11}^{2i}(y)$ comme une fonction connue de y à l'aide de $2i$ intégrations. Exactement de la même façon, on trouvera les formules des trois autres termes :

$$(33) \quad \left\{ \begin{aligned} m_{12}^{2i+1}(y_p) &= \frac{1}{2^{2i+1}y_k^{i+1}} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{\sqrt{y}} e^{2ixy+i \int_y^{y_p} \xi d\eta} \\ &\quad \int_{y_k}^y \frac{dy_1}{\sqrt{y_1}} e^{-2ix_1y_1 - \int_{\eta_1}^{y_p} \xi_1 d\eta_1} \int \dots \\ &\quad \int_{y_k}^{y_j+1} \frac{dy_j}{\sqrt{y_j}} e^{2ix_jy_j + \int_{y_j}^{y_p} \xi_j d\eta_j} m_{22}^0(y_j) \\ m_{21}^{2i+1}(y_p) &= \frac{1}{2^{2i+1}y^{i+1}} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{\sqrt{y}} e^{-2ixy - \int_{y_k}^{y_p} \xi d\eta} \int_{y_k}^y \dots \\ &\quad \int_{y_k}^{y_j+1} \frac{dy_j}{\sqrt{y_j}} e^{-2ix_jy_j - \int_{y_j}^{y_p} \xi_j d\eta_j} m_{11}^0(y_j) \\ m_{22}^{2i}(y_p) &= \frac{1}{2^{2i}y_k^i} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{\sqrt{y}} e^{-2ixy - \int_y^{y_p} \xi d\eta} \int_{y_k}^y \dots \\ &\quad \int_{y_k}^{y_j+1} \frac{dy_j}{\sqrt{y_j}} e^{2ix_jy_j + \int_{y_j}^{y_p} \xi_j d\eta_j} m_{22}^0(y_j) \end{aligned} \right.$$

où l'on doit mettre pour l'indice j de la dernière intégrale des termes (33) $j = 2i - 1$. On peut avoir un autre aspect de ces formules, comme (28'), en remplaçant l'intégrale $\int_{y_k}^x \xi d\eta$ d'après (24') et (24'') par $\Phi(x)$.

Comme nous l'avons dit les quatre éléments de la matrice M sont des polynômes de ρ . Ces polynômes ont un

nombre fini de termes quand l'intervalle x_0x' est divisé en n parties (n fini). Mais si $n \rightarrow \infty$, les éléments de la matrice deviennent des séries infinies, dont les termes se calculent d'après les formules ci-dessus. Les quatre termes de M sont :

$$(34) \quad \left\{ \begin{array}{ll} m_{11}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} m_{11}^{2i}(x), & m_{12} = \sum_{i=0}^{\infty} m_{12}^{2i+1}, \\ m_{21} = \sum_{i=0}^{\infty} m_{21}^{2i+1}, & m_{22} = \sum_{i=0}^{\infty} m_{22}^{2i} \end{array} \right.$$

Ils sont donc des fonctions connues de y , ou de x , puisque y est fonction connue de x .

Le problème que nous nous étions posé au commencement de cette étude, c'était de déterminer la proportion des corpuscules réfléchis et transmis par la barrière. Cela équivaut à la détermination de l'amplitude B_0 de l'onde réfléchie, et C , celle de l'onde transmise d'après la formule (13). Puisque la matrice M est connue, le problème est résolu en principe.

2. Convergence des séries (34).

Nous devons maintenant discuter la question de convergence des séries $m_{11}, \dots, m_{22}$ (34). Toutes les intégrales qui entrent dans les termes (32) et (33) contiennent au dénominateur $y = \sqrt{2m(E - U(x))}$. Donc les fonctions sous les intégrales deviennent infinies pour ces valeurs de x , pour lesquelles $E = U$, puisque $y = 0$. Considérons d'abord le cas où la droite d'équation $U = E$ ne coupe pas la barrière entre ses points limites x_0x' (y ne s'annule pas entre x_0 et x'). Nous avons vu que la matrice M_j (16) ou M_k (23) est presque diagonale, c'est-à-dire les modules des éléments de la diagonale principale de M_k sont voisins de un, ceux des autres termes de M_k sont très petits. Puisque la fonction $y(x)$ est continue et bornée entre x_0 et x' , on peut trouver un nombre

positif α tel que $1 + \alpha$ soit plus grand que les modules des éléments de la diagonale principale de toutes les matrices M_k ($k = 1, 2, \dots, n$), et α , plus grand que le module des deux autres éléments des matrices M_k ($k = 1, \dots, n$). Donc la matrice :

$$M_\alpha = \begin{vmatrix} 1 + \alpha & \alpha \\ \alpha & 1 + \alpha \end{vmatrix}$$

est la matrice « dominante » des M_k . M_α est identique à la matrice A (17). A la matrice M, produit de n matrices M_k , correspondra la $n^{\text{ième}}$ puissance de M_α , donc M_α^n . Nous connaissons déjà les éléments de cette dernière matrice $M_\alpha^n = A^n$ d'après (19). Nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} (a_n)_{11} &= 1 + \sum_{k=1}^n 2^{k-1} C_n^k \alpha^k = 1 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n 2^k C_n^k \alpha^k \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \sum_{k=0}^n 2^k C_n^k \alpha^k \right) = \frac{1}{2} [1 + (1 + 2\alpha)^n]. \end{aligned}$$

Avec les suppositions ci-dessus faites sur la fonction $y(x)$, quand le nombre n de division de l'intervalle $x_0 x'$ tend vers l'infini, les éléments de la diagonale principale des M_k tendent vers un, et les deux autres éléments des M_k tendent vers zéro. Donc α doit tendre vers zéro simultanément avec $\frac{1}{n}$. Si nous admettons que $\alpha = \frac{m}{n}$, où m est un nombre positif fini, nous trouverons pour la valeur limite de $(a_n)_{11}$:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (a_n)_{11} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{2} \left[1 + (1 + 2\alpha)^{\frac{m}{\alpha}} \right] = \frac{1}{2} (1 + e^{2m})$$

qui est finie. Pour le terme $(a_n)_{12}$ de M on trouve de même à l'aide de (19) :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (a_n)_{12} = \frac{1}{2} (-1 + e^{2m}).$$

Puisque $(a_n)_{11} = (a_n)_{22}$ et $(a_n)_{12} = (a_n)_{21}$, tous les éléments de A^n sont finis. Par conséquent les sommes (32) et (33) qui ont des valeurs plus petites que les valeurs de $(a_n)_{11}$, ..., $(a_n)_{22}$ sont aussi finies.

Considérons maintenant le cas où $y(x)$ s'annule dans l'intervalle $x_0 x'$. Evidemment la droite $U = E$ coupe la barrière en deux points, ou, en général, en un nombre pair de points. Admettons qu'il y en ait deux.

Les deux termes m_{11}^0 et m_{22}^0 (25) et (25'), dans lesquels on a déjà effectué une intégration, contiennent $\sqrt{y}$ au dénominateur, et seront discontinus pour $y = 0$. Cette discontinuité provient du facteur $e^{-\frac{1}{2} \int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{y}} = \sqrt{\frac{y_k}{y_p}}$ (24'), qui devient indéterminé pour $y_p = 0$. Cela montre simplement que la

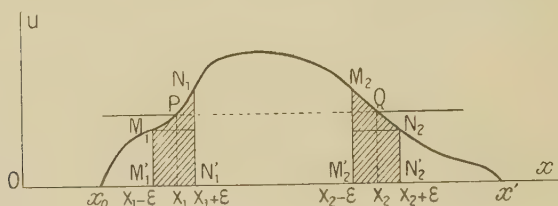


Fig. 2.

méthode de division de la barrière en un nombre très grand de barrières élémentaires de forme rectangulaire n'est pas applicable autour des points $P(x_1)$ et $Q(x_2)$ (fig. 2), où la droite $U = E$ coupe la barrière. Cependant nous pouvons toujours trancher dans la barrière deux petites barrières, qui contiennent les points P et Q , et qui s'étendent du point $M_1(x_1 - \epsilon)$ au point $N_1(x_1 + \epsilon)$ et de $M_2(x_2 - \epsilon)$ à $N_2(x_2 + \epsilon)$ respectivement (ϵ est un petit nombre positif). La barrière donnée est divisée donc en cinq barrières successives. Les formules (25) et (25') sont sûrement valables pour les trois barrières de x_0 à $x_1 - \epsilon$, de $x_1 + \epsilon$ à $x_2 + \epsilon$, et de $x_2 + \epsilon$ à x' .

Joignons les points M_1N_1 et M_2N_2 par des segments rectilignes. Les deux petits domaines hachurés forment deux barrières, où la courbe U est une ligne droite. Le passage des corpuscules à travers ces deux barrières peut être calculé comme pour la barrière rectiligne (triangulaire) à l'aide des fonctions de Bessel $J_{\frac{1}{3}}$ et $J_{-\frac{1}{3}}$, sans plus avoir la discontinuité aux points P et Q . Nous avons donc cinq barrières successives au lieu de la barrière donnée, et la solution de l'équation (1) dans chacune d'elles est connue. Le problème est théoriquement résolu, mais les calculs seront compliqués. Pour l'instant nous nous en passerons, puisque notre problème est de trouver l'onde réfléchie et l'onde transmise, et nous y arriverons autrement.

Les formules (24) et (24') montrent que la discontinuité des termes m_{11}^0 et m_{22}^0 vient de ces membres de la deuxième somme, pour lesquels $y_{k+j} = 0$. Quand on va de M_1 à N_1 (fig. 2), y varie d'une valeur réelle à une valeur purement imaginaire, en passant par zéro. Donc l'intégration dans $\int \frac{dy}{y}$ est effectuée le long du contour M_1ON_1 dans le plan de la variable complexe $\xi + i\eta$ (M_1 est sur $O\xi$, et N_1 sur On). Si l'on évite l'origine O à l'aide d'un quart de cercle C de centre O et de rayon ε , on doit calculer $\int \frac{dy}{y}$ le long du contour suivant M_1, ε ; cercle C ; $i\varepsilon, N_1$:

$$\begin{aligned} \int_{M_1}^{N_1} \frac{dy}{y} &= \int_{y_{M_1}}^{\varepsilon} \frac{dy}{y} + \int_C \frac{dy}{y} + \int_{i\varepsilon}^i |y_{N_1}| \frac{dy}{y} \\ &= \lg \frac{|y_{N_1}|}{y_{M_1}} + i \frac{\pi}{2} = \lg \frac{y_{N_1}}{y_{M_1}} \end{aligned}$$

puisque $\lg y_{N_1} = \lg |y_{N_1}| + i \frac{\pi}{2}$ d'après la définition du logarithme d'une variable complexe. Le même raisonnement étant applicable entre N_2 et M_2 , où y redevient réel, on a bien :

$$\int_{y_k}^{y_p} \frac{dy}{y} = \lg \frac{y_p}{y_k}.$$

Si la droite $U = E$ rencontre la barrière en un nombre pair de points entre les points (y_k) et (y_p) , la démonstration précédente s'applique sans changement, et l'intégrale $\int_y^{dy}$ sera donnée toujours par la formule précédente.

La conclusion que l'on tire du résultat précédent est la suivante : l'intégrale $\int_{y_k}^{y^p} \frac{dy}{y}$ a une valeur finie, parce qu'il y a une sorte de compensation des discontinuités de la fonction sous l'intégrale. D'une façon analogue on peut démontrer que toutes les intégrales dans les termes de la matrice M sont finies, malgré que les fonctions sous les intégrales soient discontinues en un nombre pair de points. On peut donc toujours employer les expressions m_{11}^0 et m_{22}^0 (25) et (25'), et les autres m_{ik} ($i, k = 1, 2$) (32) et (33) pour les calculs habituels du passage des corpuscules à travers une barrière quelconque si la fonction potentielle n'a pas de points singuliers dans l'intervalle $(x_0 x')$. Nous reviendrons plus tard encore sur ce point.

Remarque. — Le problème d'évasion des corpuscules d'une cuvette de potentiel [3] représente beaucoup d'analogie avec le problème de passage des corpuscules à travers une barrière de potentiel. Si la forme de la cuvette de potentiel est quelconque, on peut la décomposer en barrières rectangulaires, et faire les éliminations des amplitudes arbitraires à l'aide des matrices presque diagonales, comme cela a déjà été fait pour une barrière de potentiel. Nous ne nous occuperons pas ici de ce problème, puisque dans le chapitre suivant nous donnerons la résolution de l'équation de Schrödinger, et avec cela est écartée la difficulté principale du problème d'évasion des corpuscules d'une cuvette de potentiel.

CHAPITRE III

1. Résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas d'une seule variable [10].

Nous avons trouvé des formules qui donnent la proportion des particules réfléchies et transmises, quand elles tombent sur une barrière de potentiel. C'était le problème général sur les barrières de potentiel. Mais ces mêmes formules nous serviront aussi pour trouver un résultat important : la résolution de l'équation d'onde. En effet, il est facile de concevoir que les formules déterminant l'onde réfléchie et l'onde transmise doivent contenir en quelque sorte la résolution de l'équation d'onde.

La méthode que nous avons employée a consisté à décomposer une barrière de forme quelconque en petites barrières élémentaires rectangulaires. Pour chacune de celles-ci la solution de l'équation d'onde est connue : c'est une combinaison linéaire de deux ondes planes. Quand x varie par exemple de x_p à x_{p+1} , la solution de l'équation est d'après (2) :

$$(35) \quad \Psi_p(x) = A_p e^{-iy_p x} + B_p e^{iy_p x}.$$

Mais cette fonction d'onde $\Psi_p(x)$ ne satisfera plus à l'équation dès que les variations de x seront plus grandes. A ce moment nous devons tenir compte que A_p et B_p ne peuvent plus être considérées comme des constantes. Ce seront des fonctions de x . Nous avons exprimé, avec des éliminations successives, les amplitudes A_p , B_p , en fonction des ampli-

tudes A_1, B_1 , dans la première barrière élémentaire $(x_0 x_1)$ par la formule :

$$\begin{vmatrix} A_p \\ B_p \end{vmatrix} = M(x_1, x_p) \begin{vmatrix} A_1 \\ B_1 \end{vmatrix} = M_p M_{p-1} \dots M_2 M_1 \begin{vmatrix} A_1 \\ B_1 \end{vmatrix}$$

Les éléments de la matrice M , donnés par (33) et (34), sont des fonctions connues de x_p , puisque la limite supérieure des intégrales dans (33) est y_p , c'est-à-dire une fonction de x_p . Mais x_p peut prendre toutes les valeurs entre x_0 et x' . Par conséquent si l'on met en (35) les valeurs de A_p et de B_p en fonction de x , on exprimera Ψ_p en fonction de x , quand x varie dans tout l'intervalle $x_0 x'$. En prenant A_p, B_p de la dernière relation on a la solution de l'équation d'onde (1) :

$$(36) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Psi(x) = [m_{11}(x)e^{-iyx} + m_{21}(x)e^{iyx}]A_1 \\ \quad \quad \quad + [m_{12}(x)e^{-iyx} + m_{22}(x)e^{iyx}]B_1. \end{array} \right.$$

Ici on peut considérer les grandeurs A_1 et B_1 comme arbitraires, et $\Psi(x)$ dépendrait de deux paramètres arbitraires. $\Psi(x)$ (36) est donc l'intégrale générale de l'équation d'onde (1).

Quand on applique cette formule au problème des barrières, et quand on écrit les quatre conditions de continuité qui lient les paramètres A_1, B_1 avec les amplitudes A_0, B_0, C , il ne restera qu'un seul paramètre arbitraire : l'amplitude A_0 de l'onde incidente, comme on l'a vu pour une barrière rectangulaire.

Retenons maintenant dans (36) seulement les termes m_{11}^0 et m_{22}^0 de M . $\Psi(x)$ prendra la forme :

$$\Psi(x) = m_{11}^0(x)e^{-iyx}A_1 + m_{22}^0(x)e^{iyx}B_1$$

En remplaçant m_{11}^0 et m_{22}^0 par leurs expressions (25) et (25') et en posant $x_p = x$ et $x_k = x_1$, on aura :

$$(37) \quad \left\{ \begin{aligned} \Psi(x) = & A_1 \sqrt[4]{\frac{E - U(x_1)}{E - U(x)}} e^{-ix_1 y_1 - i \int_{x_1}^x \sqrt{2m(E - U(r))} dr} \\ & + B_1 \sqrt[4]{\frac{E - U(x_1)}{E - U(x)}} e^{ix_1 y_1 + i \int_{x_1}^x \sqrt{2m(E - U(r))} dr} \end{aligned} \right.$$

La comparaison de (37) avec (10) (p. 6) donne immédiatement que chacun des deux membres de $\Psi(x)$ (37) est identique à un facteur numérique près, à une des fonctions (10) que l'on trouve d'après la méthode de Brillouin-Wentzel, dans le cas le plus courant de son application. C'était, nous le savons, le cas où l'approximation de l'optique géométrique était valable.

2. Vérification que la fonction $\Psi(x)$ (36) satisfait à l'équation d'onde.

Nous devons montrer maintenant d'une manière plus directe que la fonction Ψ (36) vérifie l'équation (1). Mais si nous voulons trouver directement la deuxième dérivée de Ψ par différenciation de (37) ce sera assez difficile, puisque les termes $m_{11}, \dots, m_{22}$ (34) sont des fonctions compliquées de x .

On peut donner quelques raisons générales que Ψ (36) est la solution de (1). D'abord on a remplacé la courbe potentielle par une ligne brisée telle que la surface entre cette dernière et l'axe OX tend vers la surface de la barrière. Puisque la ligne brisée tend vers la courbe potentielle, à la limite quand $n \rightarrow \infty$, on doit s'attendre à ce que la solution trouvée tende vers la solution exacte de l'équation (1). Le doute peut apparaître au premier abord parce que les dérivées premières de la fonction, que représente la ligne brisée, sont discontinues pour n valeurs de x . Cependant cela n'influence pas le résultat, puisque c'est la fonction d'onde Ψ et sa dérivée que nous avons voulues continues sur les limites des barrières voisines élémentaires.

D'un autre côté Ψ était construite de manière que dans chaque intervalle (x_p, x_{p+1}) sa variation fût comme celle d'une fonction exponentielle. Dans cet intervalle Ψ satisfait évidemment à l'équation, mais en considérant le potentiel comme constant. La fonction Ψ est donc composée de petits arcs de courbes exponentielles, collés l'un à l'autre de manière que Ψ et sa dérivée soient continues. Puisque cela est vrai pour une division quelconque de l'intervalle $x_0 x'$, à la limite la fonction Ψ vérifiera l'équation pour chaque valeur de x . Il est donc évident que nous retrouverons cela à l'aide des calculs. Mais pour prouver plus directement que la fonction Ψ satisfait à l'équation (1), nous calculerons sa dérivée seconde. Pour une valeur x_p de x on aura la valeur de $\left(\frac{d^2\Psi}{dx^2}\right)_{x_p}$ si l'on connaît les valeurs de Ψ pour trois valeurs de x : x_p, x_{p+1}, x_{p+2} , c'est-à-dire $\Psi(x_p), \Psi(x_{p+1}), \Psi(x_{p+2})$. Nous devons trouver les deux premières différences :

$$\Psi(x_{p+2}) - \Psi(x_{p+1}) \quad \text{et} \quad \Psi(x_{p+1}) - \Psi(x_p),$$

et leur différence, divisée par Δx_p^2 , ($\Delta x_p = x_{p+1} - x_p$) donnera un rapport, dont la limite sera la valeur de $\frac{d^2\Psi}{dx^2}$ pour $x = x_p$. Ou bien on peut calculer cette valeur par la formule connue :

$$(38) \quad \left(\frac{d^2\Psi}{dx^2}\right)_{x_p} = \lim_{\Delta x_p \rightarrow 0} \frac{\Psi(x_{p+2}) - 2\Psi(x_{p+1}) + \Psi(x_p)}{\Delta x_p^2}.$$

Sans limiter la généralité nous pouvons considérer que les points de division de l'intervalle $x_0 x'$ sont équidistants, et l'on peut écrire :

$$x_{p+1} = x_p + \Delta x_p, \quad x_{p+2} = x_p + 2\Delta x_p.$$

D'après la formule (2) on peut écrire pour la fonction Ψ dans l'intervalle $x_p x_{p+1}$:

$$(2) \quad \Psi(x) = A_p e^{-iy_p x} + B_p e^{iy_p x}.$$

Mettons en (2) $x = x_{p+1} = x_p + \Delta x_p$, et développons les exponentielles, en conservant les infiniment petits jusqu'au deuxième ordre. Nous trouvons :

$$(39) \quad \Psi(x_p + \Delta x_p) = A_p e^{-iy_p x_p} \left(1 - iy_p \Delta x_p - \frac{1}{2} y_p^2 \Delta x_p^2 \right) \\ + B_p e^{iy_p x_p} \left(1 + iy_p \Delta x_p - \frac{1}{2} y_p^2 \Delta x_p^2 \right).$$

On aura pour les valeurs de Ψ dans l'intervalle (x_{p+1}, x_{p+2}) :

$$(40) \quad \Psi(x) = A_{p+1} e^{-iy_{p+1} x} + B_{p+1} e^{iy_{p+1} x}.$$

Cette formule donnera la valeur $\Psi(x_{p+2})$:

$$(40') \quad \Psi(x_{p+2}) = A_{p+1} e^{-iy_{p+1} x_{p+2}} + B_{p+1} e^{iy_{p+1} x_{p+2}}.$$

Les formules (7) et (8) expriment les A_{p+1} , B_{p+1} , en fonction de A_p , B_p . On trouvera par exemple pour A_{p+1} de (7), en y mettant :

$$x_{p+1} = x_p + \Delta x_p, \text{ et } y_{p+1} = y_p + \Delta y_p : \\ A_{p+1} = \frac{2y_p + \Delta y_p}{2(y_p + \Delta y_p)} e^{i\Delta y_p(x_p + \Delta x_p)} A_p \\ + \frac{\Delta y_p}{2i(y_p + \Delta y_p)} e^{i(2y_p + \Delta y_p)(x_p + \Delta x_p)} B_p \\ = \left(1 + \frac{\Delta y_p}{2y_p} \right) \left(1 + \frac{\Delta y_p}{y_p} \right)^{-1} e^{i\Delta y_p(x_p + \Delta x_p)} A_p \\ + \frac{\Delta y_p}{2y_p} \left(1 + \frac{\Delta y_p}{y_p} \right)^{-1} e^{i(2y_p + \Delta y_p)(x_p + \Delta x_p)} B_p.$$

Développons les expressions dans la dernière formule, en y gardant les termes jusqu'au deuxième ordre en Δx_p et Δy_p . On trouve après un calcul élémentaire, mais un peu long :

$$A_{p+1} \\ = A_p \left(1 + ix_p \Delta y_p - \frac{\Delta y_p}{2iy_p} + i\Delta x_p \Delta y_p - \frac{x_p^2 \Delta y_p^2}{2} - \frac{ix_p \Delta y_p^2}{2iy_p} + \frac{\Delta y_p^2}{2iy_p^2} \right) \\ + B_p e^{2iy_p x_p} \left(\frac{\Delta y_p}{2y_p} + i\Delta x_p \Delta y_p + \frac{ix_p \Delta y_p^2}{2y_p} - \frac{\Delta y_p^2}{2y_p^2} \right).$$

Naturellement, si on ne garde dans la dernière formule que les termes de premier ordre en Δx_p et en Δy_p , les coefficients

de A_p et de B_p , se réduisent aux termes de la première ligne de la matrice M_j (16).

Calculons maintenant le premier terme de la partie droite de (40'), en y mettant $y_{p+1} = y_p + \Delta y_p$, $x_{p+2} = x_p + 2\Delta x_p$, et A_{p+1} d'après la dernière formule. En effectuant des opérations semblables aux précédentes, on trouve :

$$\begin{aligned} A_{p+1} e^{-i(y_p + \Delta y_p)(x_p + 2\Delta x_p)} \\ = A_p e^{-ix_p y_p} \left(1 - \frac{\Delta y_p}{2y_p} - 2iy_p \Delta x_p - 2y_p^2 \Delta x_p^2 + \frac{\Delta y_p^2}{2y_p^2} \right) \\ + B_p e^{ix_p y_p} \left(\frac{\Delta y_p}{2y_p} - \frac{\Delta y_p^2}{2y_p^2} \right). \end{aligned}$$

En partant de la formule (8) pour B_{p+1} , exactement comme cela a été fait précédemment, on calculera le deuxième membre de (40') :

$$\begin{aligned} B_{p+1} e^{i(y_p + \Delta y_p)(x_p + \Delta x_p)} = A_p e^{-ix_p y_p} \left(\frac{\Delta y_p}{2y_p} - \frac{\Delta y_p^2}{2y_p^2} \right) \\ + B_p e^{ix_p y_p} \left(1 - \frac{\Delta y_p}{2y_p} + 2iy_p \Delta x_p + \frac{\Delta y_p^2}{2y_p^2} - 2y_p^2 \Delta x_p^2 \right). \end{aligned}$$

Finalement les formules précédentes permettent de trouver pour $\Psi(x_{p+2})$ (40') :

$$(40'') \quad \left\{ \begin{aligned} \Psi(x_{p+2}) &= \Psi(x_p + 2\Delta x_p) \\ &= A_p e^{-ix_p y_p} (1 - 2iy_p \Delta x_p - 2y_p^2 \Delta x_p^2) \\ &\quad + B_p e^{ix_p y_p} (1 + 2iy_p \Delta x_p - 2y_p^2 \Delta x_p^2). \end{aligned} \right.$$

Mettons dans (38) la valeur de $\Psi(x_{p+2})$ de (40''), $\Psi(x_p + \Delta x_p)$, de (39), et $\Psi(x_p)$, de (2). Nous trouverons facilement :

$$(41) \quad \left\{ \begin{aligned} \left(\frac{d^2 \Psi}{dx^2} \right)_{x_p} &= \lim_{\Delta x_p \rightarrow 0} \frac{A_p e^{-ix_p y_p} (-y_p^2 \Delta x_p^2) + B_p e^{iy_p x_p} (-y_p^2 \Delta x_p^2)}{\Delta x_p^2} \\ &= -y_p^2 (A_p e^{-iy_p x_p} + B_p e^{iy_p x_p}) = -y_p^2 \Psi(x_p). \end{aligned} \right.$$

Par conséquent la fonction $\Psi(x)$ satisfait à l'équation d'onde (1).

*
..

3. Théorème sur le coefficient de transparence et les valeurs propres.

Les considérations faites plus haut étaient valables pour des valeurs de x dans un intervalle limité x_0x' . Les séries trouvées sont convergentes, si la fonction $U(x)$ est finie. Il n'est pas nécessaire que la fonction $U'(x) = \frac{dU}{dx}$ soit continue dans l'intervalle x_0x' , pourvu qu'elle soit bornée. $U(x)$ peut être donc composée d'un nombre fini d'arcs de courbes différentes, et la solution de l'équation d'onde sera toujours représentée par (36).

Faisons maintenant tendre $x_0 \rightarrow -\infty$, $x' \rightarrow +\infty$. La fonction $\Psi(x)$ (36) vérifie toujours l'équation (1), mais elle sera en général infinie pour $x = \pm\infty$. Si la fonction $U(x)$ tend vers zéro pour $x \rightarrow \pm\infty$, la fonction d'onde reste finie pour $x = \pm\infty$. On peut le démontrer comme cela a été fait pour la matrice $M(12')$, en trouvant une matrice majorante. Mais si $U(x)$ se comporte autrement à l'infini, la fonction d'onde Ψ (36) ne sera pas bornée. Pourtant en Mécanique ondulatoire on cherche les fonctions, qui sont nulles à l'infini, ce qui se réalise pour certaines valeurs de l'énergie E . Evidemment, il n'est pas facile de trouver dans le cas général les valeurs propres de l'énergie à partir de la formule (36). Nous indiquerons la méthode qui permet de trouver en principe les valeurs propres, et à l'aide de laquelle on trouve les valeurs propres approximatives.

Si l'on se rapporte aux formules (12) et (16) (ch. I.) qui donnent le coefficient de transmission respectivement pour une barrière rectangulaire et pour une barrière en forme de l'oscillateur harmonique, on voit que ce coefficient T , qui mesure la transparence de la barrière pour les corpuscules incidents, est une fonction de l'énergie E . Cette fonction admet des maximums successifs pour une série de valeurs de E , qui

sont exactement les valeurs propres de l'équation d'onde. Nous allons voir que cette propriété reste vraie pour une forme quelconque de la barrière.

Prenons une barrière représentée par une fonction potentielle donnée $U(x)$, entre deux points M_1 et M_2 d'abscisses $x_1 = -l$, et $x_2 = l$. Dans cet intervalle l'équation d'onde sera :

$$(42) \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} [E - U(x)]\Psi = 0.$$

Supposons qu'à gauche de M_1 et à droite de M_2 le potentiel soit nul, et que l'onde incidente se propage dans le sens OX . A gauche de M_1 l'onde totale $\Psi_1(x)$ sera une somme de l'onde incidente et de l'onde réfléchie d'amplitudes correspondantes A et B . On peut écrire :

$$(43) \quad \Psi_1(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \quad k = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE}.$$

L'onde transmise Ψ_3 , à droite de M_2 , sera de la forme :

$$(44) \quad \Psi_3(x) = Fe^{ikx}.$$

Dans la région M_1M_2 la solution générale de l'équation d'onde peut être représentée comme une combinaison linéaire de deux solutions indépendantes, les ondes $\varphi(x)$ et $\chi(x)$:

$$(45) \quad \Psi_2(x) = C\varphi(x) + D\chi(x).$$

Sur les deux limites de la barrière on doit écrire les deux groupes d'équations, exprimant la continuité des fonctions et de leurs dérivées :

$$(46) \quad \begin{cases} Ae^{ikl} + Be^{-ikl} = C\varphi(-l) + D\chi(-l) \\ -ikAe^{ikl} + ikBe^{-ikl} = C\varphi'(-l) + D'\chi(-l) \end{cases}$$

$$(47) \quad \begin{cases} C\varphi(l) + D\chi(l) = Fe^{-ikl} \\ C\varphi'(l) + D\chi'(l) = -ikFe^{-ikl} \end{cases}$$

Le problème consiste à déterminer l'amplitude de l'onde

réfléchi B , et celle de l'onde transmise F , pour former le coefficient de réflexion R et le coefficient de transmission T .

Pour simplifier l'écriture nous introduirons les notations :

$$(48) \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi(-l) = \varphi_-, \quad \varphi'(-l) = \varphi'_-, \quad \varphi(l) = \varphi_+, \quad \varphi'(l) = \varphi'_+, \\ \chi(-l) = \chi_-, \quad \chi'(-l) = \chi'_-, \quad \chi(l) = \chi_+, \quad \chi'(l) = \chi'_+. \end{array} \right.$$

Formons le déterminant $\Delta(-l)$ des coefficients de C et de D de (46) :

$$(49) \quad \Delta(-l) = \Delta_- = \begin{vmatrix} \varphi_- & \chi_- \\ \varphi'_- & \chi'_- \end{vmatrix} = \varphi_- \chi'_- - \varphi'_- \varphi_-$$

et de même $\Delta(l) = \Delta_+$ de (47).

De (55) on tire facilement :

$$(50) \quad \left\{ \begin{array}{l} C = \frac{1}{\Delta_-} [A e^{ikl} (\chi'_- + ik \chi_-) + B e^{-ikl} (\chi'_- - ik \chi_-)] \\ D = \frac{1}{\Delta_-} [-A e^{ikl} (\varphi'_- + ik \varphi_-) + B e^{-ikl} (ik \varphi_- - \varphi'_-)] \end{array} \right.$$

Les équations (47) donneront pour les mêmes grandeurs :

$$(51) \quad \left\{ \begin{array}{l} C = \frac{F e^{-ikl}}{\Delta_+} (\chi'_+ + ik \chi_+) \\ D = \frac{-F e^{-ikl}}{\Delta_+} (\varphi'_+ + ik \varphi_+) \end{array} \right.$$

En égalant les valeurs de C et de D d'après (50) et (51), on trouve les équations :

$$(52) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Delta_+ e^{-ikl} (\chi'_- - ik \chi_-) B - \Delta_- e^{-ikl} (\chi'_+ + ik \chi_+) F \\ \quad \quad \quad = -\Delta_+ e^{ikl} (\chi'_- + ik \chi_-) A \\ \Delta_+ e^{-ikl} (ik \varphi_- - \varphi'_-) B - \Delta_- e^{-ikl} (\varphi'_+ + ik \varphi_+) F \\ \quad \quad \quad = \Delta_+ e^{ikl} (\varphi'_- + ik \varphi_-) A \end{array} \right.$$

Le déterminant d des coefficients de B et de F de (52) s'écrit :

$$(53) \quad \left\{ \begin{array}{l} d = \Delta_+ \Delta_- e^{-2ikl} [(\chi'_- - ik \chi_-)(\varphi'_+ + ik \varphi_+) \\ \quad \quad \quad + (ik \varphi_- - \varphi'_-)(\chi'_+ + ik \chi_+)] \end{array} \right.$$

et l'on aura pour les valeurs de B et de F, tirées de (52) :

$$(54) \quad \left\{ \begin{aligned} B = & \frac{\Delta_+ \Delta_-}{a} A [-(\chi'_- + ik\chi_-)(\varphi'_+ + ik\varphi_+) \\ & + (\varphi'_- + ik\varphi_-)(\chi'_+ + ik\chi_+)]. \end{aligned} \right.$$

$$(55) \quad \left\{ \begin{aligned} F = & \frac{(\Delta_+)^2}{a} A [(\chi'_- - ik\chi_-)(ik\varphi_- + \varphi'_-) \\ & + (ik\varphi_- - \varphi'_-)(\chi'_- + ik\chi_-)]. \end{aligned} \right.$$

Nous chercherons maintenant à évaluer l'ordre de grandeur de | B | et de | F | d'après les valeurs de l'énergie E des corpuscules incidents. Considérons le cas où l est très grand, c'est-à-dire la base de la barrière est très longue. Donc pour calculer B et F d'après (54) et (55), nous n'aurons besoin que des valeurs asymptotiques de φ et de χ .

Puisque l'équation d'onde (42) coïncide avec sa propre conjuguée, on démontre facilement [14] que le déterminant Δ (49) a une valeur constante pour toute valeur de x , quand les solutions φ et χ sont indépendantes. Mais il est facile de prouver directement cette propriété. En effet, remplaçons dans l'équation (42) successivement les fonctions χ et φ . Multiplions la première de ces équations par φ , la seconde par χ , et retranchons. On aura :

$$(56) \quad 0 = \varphi\chi'' - \chi\varphi'' = \frac{d}{dx}(\varphi\chi' - \varphi'\chi) = \frac{d}{dx}\Delta.$$

Par conséquent, le déterminant Δ est constant :

$$(57) \quad \Delta = \varphi\chi' - \varphi'\chi = \varphi\chi \left(\frac{\chi'}{\chi} - \frac{\varphi'}{\varphi} \right) = \text{cte.}$$

Nous pouvons maintenant considérer que les notations (48) représentent les valeurs asymptotiques de φ et de χ pour $x \rightarrow -\infty$ et $x \rightarrow +\infty$ respectivement. L'égalité (57) montre que les valeurs asymptotiques φ_- et χ_- par exemple, ne peuvent pas être nulles simultanément, puisque Δ_- serait nul dans ce dernier cas. φ_- et χ_- ne peuvent pas être non

plus simultanément infiniment grandes, puisque d'après (57) l'expression dans la parenthèse doit tendre vers zéro, et l'on en tirerait $\lg \chi = \lg \varphi$, donc les valeurs asymptotiques φ_- et χ_- ne seraient pas indépendantes. Par contre, φ_- et χ_- peuvent être finies simultanément, ce qui se réalise quand l'équation d'onde a un spectre continu. Les raisonnements précédents peuvent être répétés sans changement pour φ_+ et χ_+ .

En tenant compte de (57) et de (53), on peut écrire pour F (55) :

$$(58) \quad \left\{ \begin{aligned} |F| &= \left| A \frac{(\chi'_- - ik\chi_-)(ik\varphi_- + \varphi'_-) + (\chi'_+ + ik\chi_-)(ik\varphi_- - ik\varphi'_-)}{(\chi'_- - ik\chi_-)(\varphi'_+ + ik\varphi_+) + (\chi'_+ + ik\chi_+)(ik\varphi_- - \varphi'_-)} \right| \\ &= \left| A \frac{a_1 b_1 + a_2 b_2}{a_1 b'_1 + a'_2 b_2} \right| \end{aligned} \right.$$

où l'on a remplacé, pour abréger l'écriture, les expressions entre parenthèses au numérateur, dans le même ordre, par les lettres a_1, b_1, a_2, b_2 , et de même au dénominateur.

Supposons que l'équation d'onde ait un spectre discret, et considérons le cas, où l'énergie E n'est pas égale à une de ses valeurs propres. En tenant compte des raisonnements précédents, on peut poser, sans restreindre la généralité :

$$(59) \quad \left\{ \begin{aligned} \varphi_- \rightarrow \infty, \quad \varphi'_- \rightarrow \infty, \quad \chi_- \rightarrow 0, \quad \chi'_- \rightarrow 0 \\ \varphi_+ \rightarrow 0, \quad \varphi'_+ \rightarrow 0, \quad \chi_+ \rightarrow \infty, \quad \chi'_+ \rightarrow \infty. \end{aligned} \right.$$

D'après (58) on voit que les expressions a_1 et a_2 sont de même ordre de grandeur, comme b_1 et b_2 d'un autre côté, et au numérateur nous ne garderons que l'expression $a_1 b_1$, qui est de l'ordre de l'expression $a_2 b_2$. Il résulte aussi des formules (59), que le terme $a_1 b'_1$ au dénominateur est infiniment petit par rapport au terme $a'_2 b_2$, et nous ne garderons que ce dernier. Finalement la valeur approximative de $|F|$ (58) sera donnée par :

$$(60) \quad \left\{ \begin{array}{l} |F| \sim \left| A \frac{(\chi'_- - ik\chi_-)(ik\varphi_- + \varphi'_-)}{(\chi'_+ + ik\chi_+)(ik\varphi_- - \varphi'_-)} \right| \\ \sim \left| A \frac{\chi'_- - ik\chi_-}{\chi'_+ + ik\chi_+} \right| = \left| A \frac{a_1 b_1}{a_1 b'_1} \right| \end{array} \right.$$

D'après (59), c'est une valeur extrêmement petite, puisque le numérateur est infiniment petit, et le dénominateur infiniment grand.

Prenons maintenant le cas, où E est égale à l'une des valeurs propres de l'équation (42). Si E n'est pas une valeur propre double, une des fonctions, par exemple φ , sera une fonction propre. On aura maintenant, au lieu de (59) :

$$(59') \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi_- \rightarrow 0, \quad \overline{\varphi_-} \rightarrow 0, \quad \chi_- \rightarrow \infty, \quad \overline{\chi_-} \rightarrow \infty \\ \overline{\varphi_+} \rightarrow 0, \quad \overline{\varphi_+} \rightarrow 0, \quad \chi_+ \rightarrow \infty, \quad \overline{\chi_+} \rightarrow \infty \end{array} \right.$$

où le trait au-dessus des fonctions est mis pour les distinguer des valeurs (59). Mais puisque les valeurs (59'), comme (59), sont les valeurs asymptotiques des solutions de l'équation (42), on doit avoir que $\overline{\varphi_-}$ est de l'ordre de χ_- , $\overline{\varphi_-} \sim \chi_-$, et de même :

$$(59'') \quad \overline{\varphi_+} \sim \varphi_+, \quad \overline{\chi_-} \sim \varphi_-, \quad \overline{\chi_+} \sim \chi_+.$$

Rapportons-nous maintenant à la formule (58). Ici aussi, les termes $a_1 b_1$ et $a_2 b_2$ sont du même ordre, et l'on aura, en ne gardant que le premier :

$$(60') \quad \left\{ \begin{array}{l} |\overline{F}| \sim \left| A \frac{(\overline{\chi_-} - ik\overline{\chi_-})(ik\overline{\varphi_-} + \overline{\varphi'_-})}{(\overline{\chi_-} - ik\overline{\chi_-})(\overline{\varphi'_+} + ik\overline{\varphi_+}) + (\chi'_+ + ik\chi_+)(ik\overline{\varphi_-} - \overline{\varphi'_-})} \right| \\ = \left| A \frac{\overline{a_1} \overline{b_1}}{\overline{a_1} \overline{b'_1} + \overline{a'_2} \overline{b_2}} \right| \end{array} \right.$$

A l'aide de (59') et de (59'') on peut écrire :

$$(61) \quad |F| \sim \left| A \frac{(\varphi'_- - ik\varphi_-)(ik\chi_- + \chi'_-)}{(\varphi'_+ - ik\varphi_+)(\varphi'_- + ik\varphi_-) + (\chi'_+ + ik\chi_+)(ik\chi_- - \chi'_-)} \right|.$$

Les numérateurs de (61) et de (60) sont du même ordre, tandis que le dénominateur de (60) est infiniment grand par rapport aux deux termes du dénominateur de (61), comme le montrent les formules (59). Donc la valeur de F (60) est infiniment petite par rapport à la valeur de F (61), qui peut être un nombre fini, de l'ordre de l'unité. On peut, par conséquent, énoncer le théorème : *Le coefficient de transmission* $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$, *qui caractérise la transparence de la barrière, a des maximums successifs pour ces valeurs de l'énergie E , qui sont des valeurs propres de l'équation (42).* C'est un phénomène de résonance.

La même étude sur le coefficient B (54) donne, que B est de l'ordre de l'unité, puisque son numérateur et son dénominateur sont du même ordre. Mais puisque la somme $R + T = \frac{|B|^2 + |F|^2}{|A|^2} = 1$, le coefficient R aura des minimums pour ces valeurs de E , qui sont égales aux valeurs propres de l'équation (42). Pourtant ces minimums sont beaucoup moins marqués que les maximums de T .

Supposons maintenant que l'équation (42) possède un spectre continu. Donc pour toute valeur de E dans un intervalle, fini ou infini, (42) aura au moins une solution, dont les valeurs asymptotiques sont finies. Puisque le déterminant Δ (49) est constant, il ne peut y avoir que deux possibilités : ou bien les valeurs asymptotiques φ_- , χ_- (et φ_+ , χ_+) sont finies simultanément, ou bien φ_- , φ_+ sont nulles, et χ_- , χ_+ sont infinies. Dans les deux cas, en faisant les mêmes considérations comme plus haut, on trouve pour F (55), et par conséquent pour T , des valeurs finies. Si le coefficient T , qui est fonction de E et de l , admet des maximums et des minimums par rapport à E , ces maximums et minimums sont de même ordre de grandeur, pour toute valeur fixée de l . Au contraire, si l'équation (42) a un spectre discret, et si l a une valeur fixe très grande, les maximums de T par rapport à E ont des valeurs finies, tandis que ses minimums sont

très petits, et ils tendent vers zéro, quand l tend vers l'infini.

La propriété, énoncée plus haut, peut donc servir pour chercher les valeurs propres de l'équation d'onde. — On doit, pour cela, former le coefficient de transparence T , pour une barrière de base très longue, et chercher les racines E_k de l'équation $\frac{\partial}{\partial E} T = 0$. Si la valeur de T est finie pour une valeur de E entre deux racines quelconques, E_k et E_j , ces racines appartiennent à un spectre discret et *vice versa*.

Puisque dans les applications on se sert d'une fonction d'onde approchée, on trouvera des valeurs approchées pour les E_k .

En mettant les valeurs E_k ainsi trouvées dans (36), on trouvera les fonctions propres Ψ_k . Si la base $(x_0 x')$ de notre barrière augmente indéfiniment, on doit s'attendre à ce que les Ψ_k soient finies à des distances finies de l'origine O , et très petites vers l'infini. Les autres fonctions Ψ (36) qui ne sont pas des fonctions propres doivent, au contraire, s'aplatir sur l'axe OX , et deviennent nulles quand $x_1 \rightarrow -\infty$ et $x' \rightarrow +\infty$. On aura un phénomène analogue au paradoxe de l'oscillateur harmonique [3].

La fonction (37), à l'aide de laquelle on effectue souvent des calculs approchés, représente une première approximation de la fonction d'onde, et l'on doit se rendre compte du degré d'approximation que l'on a en se limitant à cette forme de la fonction d'onde. D'après (37) on voit que les exposants dans les membres de $\Psi(x)$ contiennent l'intégrale de Maupertuis (24"). Cela indique déjà que la fonction (37) doit être valable à l'approximation de l'optique géométrique. Nous avons aussi vu que les deux membres de (37) coïncident, à un facteur numérique près, avec la fonction (10) (p. 6), donnée par la méthode Brillouin-Wentzel. L'apparition de cette dernière fonction montre que l'approximation de l'optique géométrique est réalisée c'est-à-dire que la condition $\frac{1}{n} \frac{dn}{dx} \lambda \ll 1$ existe.

Comparons aussi directement la formule approchée (37) à la formule exacte (36). Pour former la fonction (37) nous avons retenu seulement les termes m_{11}^0 et m_{22}^0 de la matrice $M(12')$. En se rapportant aux formules (33) et (34), on voit que tous les termes de (34) contiennent des intégrations par rapport à y , ou bien par rapport à x , puisque $dy = y'dx$. Si la barrière est rectangulaire, le potentiel est constant, $dy = 0$, donc toutes les intégrales sont nulles. Les seuls termes de la matrice $M(12')$ qui seront différents de zéro sont m_{11}^0 et m_{22}^0 , pour lesquels on aura $m_{11}^0 = m_{22}^0 = 1$, comme le montrent les formules (25) et (25'). La matrice M se confondra avec la matrice unité, par conséquent l'onde plane incidente Ψ_0 restera monochromatique après son entrée dans la barrière. Il est donc clair que si le potentiel $U(x)$ varie lentement, ce sont les termes m_{11}^0 et m_{22}^0 qui prédominent parmi tous les $m_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2$) des formules (34). Prenons le terme m_{12}^4 (26') et mettons dans l'intégrale $dy = y'dx$. On voit aisément que ce terme peut être négligé devant les termes m_{11}^0 et m_{22}^0 , si $\frac{y'}{y} \ll 1$, ou encore $\frac{1}{n} \frac{dn}{dx} \ll 1$ (puisque y est proportionnel à n), donc si l'indice de réfraction n varie lentement. Evidemment il est plus difficile d'exprimer d'après cette méthode que d'après la méthode Brillouin-Wentzel la condition exacte qui indique le cas où les termes m_{12}^4 et m_{21}^4 sont à négliger devant m_{11}^0 et m_{22}^0 , puisque les m_{14}^0 , m_{22}^0 et m_{12}^1 , m_{21}^1 ne sont pas liés par une relation simple.

Dans les problèmes particuliers sur les barrières de potentiel on se sert souvent de la forme (10) (p. 6) de la fonction d'onde, donnée par la méthode Brillouin-Wentzel. Nous avons vu (p. 6) que cette formule n'est sûrement pas applicable aux voisinages des points $P(x)$, pour lesquels $E = U(x)$. Pourtant cette forme de Ψ , appliquée pour le calcul des coefficients de réflexion et de transmission, donne toujours le gros du phénomène, bien que la barrière soit coupée au moins en deux

points par la droite d'équation $U = E$. Mais après les considérations que nous avons faites (p. 33) sur les termes m_{11}^0 et m_{22}^0 pour ce cas, il suit que *l'emploi de la fonction (10) ou bien de la fonction (37) est légitime pour tous les calculs habituels des barrières de potentiel.*

4. Points singuliers de $\Psi(x)$.

Points de rebroussement.

Nous avons vu que les points $P(x_1)$ et $Q(x_2)$, où la droite $U = E$ coupe la barrière, représentent des points singuliers pour la fonction d'onde Ψ (36). Quand on applique (36) pour le calcul du coefficient de réflexion R et du coefficient de transmission T , cette discontinuité ne nous gêne point, comme nous l'avons vu. Mais la fonction (36), telle qu'elle est, ne correspond pas à la définition d'une fonction d'onde dans tout l'intervalle (x, x') , puisqu'elle devient infinie aux points P et Q . Nous devons nous affranchir maintenant de cette difficulté.

L'existence de la discontinuité de la fonction $\Psi(x)$ aux points P et Q prouve qu'au voisinage des points P et Q on ne peut pas faire la décomposition de la barrière donnée en barrières élémentaires rectangulaires. L'équation d'onde montre, en effet, que la fonction d'onde dans un domaine de potentiel constant $U < E$, mais très voisin de E ($U \sim E$), est une fonction périodique très lentement variable. Pour le cas limite $E = U$ elle devient une fonction linéaire de x , et elle n'est plus, à proprement parler, fonction périodique. La barrière élémentaire rectangulaire, qui contient le point P , doit donc être remplacée par une autre barrière élémentaire, formée par un arc de courbe qui ne se distingue pas beaucoup de l'arc correspondant sur la courbe potentielle (l'arc M_1N_1 de la figure 2). On sait [8] que la forme exacte de la courbe potentielle U autour des bords d'une barrière se manifeste beaucoup dans les formules de transparence des

barrières, si l'énergie E de l'onde plane incidente est voisine des valeurs que prend U sur les bords de la barrière.

Pour cette raison nous pouvons remplacer l'arc M_1N_1 (fig. 2) par un segment rectiligne M_1N_1 et faire les calculs de barrières avec cette barrière élémentaire au lieu d'une barrière rectangulaire. Mais si le potentiel U est fonction linéaire de x , la solution de l'équation d'onde est donnée par les fonctions de Bessel $J_{\frac{1}{3}}$ et $J_{-\frac{1}{3}}$, et les calculs se com-

pliquent. Nous les éviterons pour l'instant et nous chercherons une solution approchée, valable au voisinage de P et de Q , et tout à l'heure nous trouverons une solution exacte, valable autour de P et de Q .

Puisqu'aux points P et Q on a $E = U$, l'équation d'onde (1) montre que $\frac{d^2\Psi}{dx^2} = 0$, c'est-à-dire la fonction Ψ a deux points d'inflexion $P(x_1)$ et $Q(x_2)$, et l'on peut la représenter très approximativement dans la région $(x_1 - \varepsilon, x_1 + \varepsilon)$ (ε étant un petit nombre positif fini) par la fonction linéaire $\Psi(x) = ax + b$. La décomposition de la barrière en barrières rectangulaires est valable hors du domaine $(x_1 - \varepsilon, x_1 + \varepsilon)$. On doit écrire sur les limites de la barrière rectiligne, de base $(x_1 - \varepsilon, x_1 + \varepsilon)$, les conditions de continuité et éliminer les grandeurs a et b . De cette façon les amplitudes A_p, B_p , que nous trouvons en décomposant la barrière donnée hors des intervalles $(x_1 - \varepsilon, x_1 + \varepsilon)$ et $(x_2 - \varepsilon, x_2 + \varepsilon)$, sont liées entre elles par l'intermédiaire de la fonction $ax + b$, où a et b sont déjà connus. La même opération doit être effectuée au point x_2 .

La fonction d'onde $\Psi(x)$ construite à l'aide de ces matrices de transformation et de la matrice M est continue aux points P et Q , mais elle n'est pas représentée par une même expression analytique dans tout le domaine x_0, x' , où s'étend la barrière. Elle est linéaire dans les régions $(x_1 - \varepsilon, x_1 + \varepsilon)$ et $(x_2 - \varepsilon, x_2 + \varepsilon)$, et elle est donnée par (36) dans le reste de l'intervalle (x_0, x') .

5. Une deuxième méthode pour résoudre l'équation d'onde.

Une autre difficulté se présente aux points qui sont des points singuliers pour le potentiel. Nous admettrons que ces points sont des pôles. Soit le point O un pôle d'ordre p pour la fonction $U(x)$. Autour du point O la décomposition de la barrière en barrières élémentaires est fictive. On peut voir que si nous faisons cette décomposition près du point O , ce point sera un point singulier pour la fonction $\Psi(x)$ (36), que nous avons appris à construire à l'aide des barrières élémentaires. Nous devons donc changer de méthode au voisinage de O .

Nous esquisserons une autre méthode de résolution de l'équation (1). Avec cette méthode nous trouverons la solution, qui reste finie au voisinage de O .

L'intégrale générale de (1) contient deux constantes arbitraires. Par conséquent, par deux points quelconques donnés passe une courbe intégrale, ou encore par chaque point donné passe une courbe intégrale, dont la tangente au point fait un angle donné avec l'axe OX . Soit $P_0(x_0)$ le point donné. La fonction Ψ et sa dérivée Ψ' prennent les valeurs arbitraires Ψ_0 et Ψ'_0 en P_0 . Pour un accroissement Δx_0 de x on trouvera les valeurs Ψ_1 et Ψ'_1 de Ψ et Ψ' , données par les formules :

$$(62) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Psi_1 = \Psi_0 + \Delta x_0 \Psi'_0 \\ \Psi'_1 = \Psi'_0 + \Delta x_0 \Psi''_0 = \Psi'_0 - f_0 \Psi_0 \end{array} \right.$$

Dans la dernière formule on a remplacé Ψ''_0 par $-y_0\Psi_0$ et posé $y_0^2 = f_0$. Ψ_1 et Ψ'_1 sont des fonctions linéaires de Ψ_0 et Ψ'_0 , et l'on peut remplacer (62) par la relation vectorielle :

$$(63) \quad \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi'_1 \end{vmatrix} = N_0 \begin{vmatrix} \Psi_0 \\ \Psi'_0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & \Delta x_0 \\ -f_0 \Delta x_0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_0 \\ \Psi'_0 \end{vmatrix}$$

où N_0 est une matrice presque diagonale. Avec les mêmes relations on trouvera les valeurs :

$$\Psi_2 = \Psi(x_0 + 2\Delta x_0) \quad \text{et} \quad \Psi'_2 = \Psi'(x_0 + 2\Delta x_0)$$

en fonction de Ψ_1 et Ψ'_1 . En éliminant les grandeurs Ψ_1 et Ψ'_1 on aura une relation entre Ψ_2 , Ψ'_2 et Ψ_0 , Ψ'_0 . Comme pour les grandeurs A_j , B_j (p. 17) on aboutira à la formule suivante, après les éliminations successives des Ψ_k , Ψ'_k :

$$(64) \quad \begin{vmatrix} \Psi_p \\ \Psi'_p \end{vmatrix} = N \begin{vmatrix} \Psi_0 \\ \Psi'_0 \end{vmatrix}$$

où :

$$(65) \quad N = \prod_{i=1}^p N_i = \prod_{i=1}^p \begin{vmatrix} 1 & \Delta x_i \\ -f_i \Delta x_i & 1 \end{vmatrix}$$

est la matrice de transformation. Puisque la matrice N_i ressemble à la matrice $B(20)$, le produit N sera formé comme la matrice produit $M(12')$. Les Δx_i de N_i correspondent aux facteurs ρ_i dans les éléments de $M_i(16)$. Par conséquent les quatre éléments $n_{\alpha\beta}(\alpha, \beta = 1, 2)$ de N seront des sommes, dont les membres contiennent les facteurs Δx_i , $\Delta x_i \Delta x_k$, ... Dans l'élément n_{11} de la matrice N , produit de p matrices N_i , indiquons par $n_{11}^{2k,p}$ le terme, qui est la somme des termes, contenant $2k$ facteurs Δx . On trouve (comme 27 et 27') les formules de récurrence :

$$(66) \quad \begin{cases} n_{11}^{2k,p} = n_{11}^{2k,p-1} + n_{21}^{2k-1,p-1} \Delta x_p \\ n_{12}^{2k+1,p} = n_{12}^{2k+1,p-1} + n_{22}^{2k,p-1} \Delta x_p \\ n_{21}^{2k+1,p} = -n_{11}^{2k,p-1} f_p \Delta x_p + n_{21}^{2k+1,p-1} \\ n_{22}^{2k,p} = -n_{12}^{2k-1,p-1} f_p \Delta x_p + n_{22}^{2k,p-1} \end{cases}$$

où $n_{12}^{2k+1,p}$, $n_{21}^{2k+1,p}$, $n_{22}^{2k,p}$ sont définis de la même façon que l'élément $n_{11}^{2k,p}$. Sur les formules (66) on peut effectuer les mêmes opérations qui suivent les formules (27) et l'on représentera les $n_{\alpha\beta}$ comme des fonctions explicites de x . Comme pour (28) on trouvera d'abord :

$$(67) \quad n_{11}^{2k}(x_p) = \int_{x_0}^{x_p} n_{21}^{2k-1}(x) dx$$

et en remplaçant $n_{21}^{2k-1}(x)$, ... on arrivera à la formule :

$$(68) \quad \left\{ \begin{array}{l} n_{41}^{2k}(x_p) = (-1)^k \int_{x_0}^{x_p} dx^{(2k-1)} \\ \int_{x_0}^{x^{(2k-1)}} f(x^{(2k-2)}) dx^{(2k-2)} \int_{x_0}^{x^{(2k-2)}} \dots \int_{x_0}^{x^{(1)}} f(x) dx. \end{array} \right.$$

où l'on a indiqué avec des indices supérieurs les variables, qui remplacent formellement la variable x . On aura aussi les trois formules qui correspondent à (33) :

$$(69) \quad \left\{ \begin{array}{l} n_{12}^{2k+1}(x_p) \\ = (-1)^k \int_{x_0}^{x_p} dx^{(2k)} \int_{x_0}^{x^{(2k)}} f dx^{(2k-1)} \int_{x_0}^{x^{(2k-1)}} \dots \int_{x_0}^{x^{(1)}} dx \\ n_{21}^{2k+1}(x_p) \\ = (-1)^k \int_{x_0}^{x_p} f dx^{(2k)} \int_{x_0}^{x^{(2k)}} dx^{(2k-1)} \int_{x_0}^{x^{(2k-1)}} \dots \int_{x_0}^{x^{(1)}} f dx \\ n_{22}^{2k}(x_p) \\ = (-1)^k \int_{x_0}^{x_p} f dx^{(2k-1)} \int_{x_0}^{x^{(2k-1)}} dx^{(2k-2)} \int_{x_0}^{x^{(2k-2)}} \dots \int_{x_0}^{x^{(1)}} dx \end{array} \right.$$

et les quatre éléments de N seront donnés, comme (34), par :

$$(70) \quad n_{41} = \sum_{k=0}^{\infty} n_{11}^{2k}, n_{42} = \sum_{k=0}^{\infty} n_{12}^{2k+1}, n_{21} = \sum_{k=0}^{\infty} n_{22}^{2k+1}, n_{22} = \sum_{k=0}^{\infty} n_{22}^{2k}.$$

Une fois la matrice N connue, (64) donne les valeurs de Ψ et de Ψ' pour toute valeur de x . On a de (64) :

$$(71) \quad \Psi(x) = n_{41}(x) \Psi_0 + n_{42}(x) \Psi'_0.$$

Puisque Ψ_0 et Ψ'_0 sont des constantes arbitraires, $\Psi(x)$ (71) est l'intégrale générale de (1).

Dans tout l'intervalle de variation de x , où $f(x)$ est bornée, la matrice produit N (65) est finie. On le démontre comme on l'a fait pour la matrice M (p. 31) : on peut trouver une matrice majorante M_x , dont la puissance quelconque est finie. On n'a donc pas à craindre les points de rebroussement dans la solution (71). Malgré cela la solution (71) n'est pas toujours aussi commode que (36), puisqu'elle ne fait pas apparaître immédiatement les propriétés essentielles de la fonction

d'onde. En effet, si la fonction potentielle est donnée, par exemple, par un polynôme de x , les formules (68) et (68') montrent que les n_{11}^{2k} , ... (68') s'expriment facilement comme des polynômes de x , donc les $m_{\alpha\beta}$ (70) seront donnés par des séries infinies suivant les puissances de x , absolument convergentes d'ailleurs, puisque N est finie. On sait, par contre, que la solution approchée (37), que l'on trouve de la solution exacte (36), donne l'approximation de l'optique géométrique.

Nous avons supposé que la fonction potentielle avait un pôle d'ordre p au point O . Il ne nous sera pas difficile maintenant de construire, à l'aide de (71), la solution de l'équation (1), qui reste finie autour de O . Nous exigerons que la fonction d'onde et ses dérivées jusqu'à $p^{\text{ième}}$ ordre au moins soient nulles au point O :

$$\Psi_{(0)} = \Psi_{(0)}^{(1)} = \Psi_{(0)}^{(2)} = \dots = \Psi_{(0)}^{(l)} = 0, \quad \Psi_{(0)}^{(l+1)} \neq 0, \quad l \geq p.$$

Cela ne veut évidemment pas dire que la fonction Ψ (71) devient identiquement nulle, puisque $\Psi_0 = \Psi'_0 = 0$, mais que pour trouver les valeurs $\Psi_1 = \Psi(\Delta x)$ et $\Psi'_1 = \Psi'(\Delta x)$ d'après (62) on doit commencer par ce terme du développement de Taylor, terme qui n'est pas nul pour $x = 0$, et qui est proportionnel à $\Psi^{(l+1)}$:

$$(72) \quad \Psi_1 = a_0(\Delta x)^{l+1}, \quad \Psi'_1 = b_0(\Delta x)^l$$

où a_0 , b_0 sont des constantes arbitraires. On n'a qu'à recommencer à construire de proche en proche les valeurs de $\Psi(x)$ et de $\Psi'(x)$. La formule (71) reste valable en y remplaçant Ψ_0 et Ψ'_0 par Ψ_1 et Ψ'_1 (72). Cette fonction est finie dans tout intervalle fini de variation de x , et nulle au point O .

Revenons maintenant à notre barrière de potentiel, qui s'étend de x_0 à x' , avec $x_0 < 0 < x'$, et soit le point O un pôle d'ordre p pour le potentiel. Par deux verticales, passant par les points O_1 et O_2 d'abscisses $-\delta$ et δ (δ est un petit nombre positif) nous limiterons une barrière, qui contient le pôle.

Entre les points O_1 et O_2 la solution exigée de l'équation d'onde (1) sera de la forme (71), et hors de l'intervalle O_1O_2 , de la forme (36). Aux points O_1 et O_2 on doit écrire les deux conditions de continuité, pour lier la solution dans l'intervalle O_1O_2 avec celles de son extérieur. La fonction d'onde finale sera donc présentée par des expressions analytiques différentes dans les parties indiquées de l'intervalle x_0x' , mais elle sera partout finie.

Pour les calculs approximatifs concernant les problèmes des barrières on ne retiendra de la fonction (71) que les premiers termes du développement des $n_{\alpha\beta}$ (70).

Puisque les points de rebroussement P et Q sont des points ordinaires pour la fonction (71), nous pouvons nous en servir pour éviter P et Q comme points singuliers de la fonction (36). Mais au voisinage des points P et Q la fonction (71) est sensiblement linéaire, puisque $f = 2m(E - U) \sim 0$, comme on s'aperçoit de (62). C'est exactement une fonction linéaire que nous avons employée (p. 51) autour des points P et Q, sans construire préalablement la fonction (71).

Dans le problème de résolution de l'équation d'onde pour plusieurs corpuscules nous aurons à faire des considérations de ce genre pour les points singuliers, et nous nous servirons des résultats précédents.

6. Application de la méthode précédente au cas de potentiel linéaire.

Nous allons appliquer la méthode précédente de résolution de l'équation d'onde dans un cas simple, où la fonction potentielle est linéaire. Nous avons vu (barrière triangulaire, p. 10), que l'on a été amené à étudier l'équation d'onde :

$$(73) \quad \frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} (E - C - F\xi)\Psi = 0.$$

En posant :

$$(74) \quad x = \left(\frac{8\pi^2 m}{h^2} F \right)^{\frac{1}{3}} \left(-\frac{C-E}{F} + \xi \right)$$

l'équation (73) devient :

$$(75) \quad \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + x \Psi = 0.$$

Les solutions indépendantes de cette équation sont les fonctions $\sqrt{x} J_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right)$ et $\sqrt{x} J_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right)$, où $J_{\frac{1}{3}}$ et $J_{-\frac{1}{3}}$ sont les fonctions de Bessel d'ordre $\frac{1}{3}$ et $-\frac{1}{3}$. La fonction de Bessel d'ordre λ , où λ n'est pas un nombre entier négatif, est :

$$J_{\lambda}(x) = \left(\frac{x}{2} \right)^{\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{x}{2} \right)^{2n} \frac{1}{\Gamma(n + \lambda + 1)}.$$

Cette formule donne pour $\lambda = \pm \frac{1}{3}$, les fonctions :

$$(76) \quad J_{\pm \frac{1}{3}}(x) = \left(\frac{x}{2} \right)^{\pm \frac{1}{3}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{x}{2} \right)^{2n} \frac{1}{\Gamma(n \pm \frac{1}{3} + 1)}.$$

Comme on le sait, la fonction Γ vérifie l'équation fonctionnelle :

$$\Gamma(x + 1) = x \Gamma(x).$$

En appliquant successivement cette formule pour $x = n$, $n - 1$, ..., on trouve :

$$(77) \quad \begin{cases} \Gamma(n + \frac{1}{3} + 1) = \left(\frac{1}{3} + n \right) \left(\frac{1}{3} + n - 1 \right) \dots \frac{4}{3} \cdot \frac{1}{3} \cdot \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \\ = \frac{1}{3^n} [1 + 3n][1 + 3(n-1)] \dots 7 \cdot 4 \cdot 1 \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \end{cases}$$

$$(77') \quad \begin{cases} \Gamma(n - \frac{1}{3} + 1) \\ = \left(-\frac{1}{3} + n \right) \left(-\frac{1}{3} + n - 1 \right) \dots \frac{8}{3} \cdot \frac{5}{3} \cdot \frac{2}{3} \left(-\frac{1}{3} \right) \Gamma\left(-\frac{1}{3}\right) \\ = \frac{1}{3^n} [-1 + 3n][-1 + 3(n-1)] \dots 5 \cdot 2 (-1) \Gamma\left(-\frac{1}{3}\right) \end{cases}$$

Calculons maintenant $\sqrt{x} J_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right)$ d'après (76) et (77) :

$$(78) \left\{ \begin{aligned} \sqrt{x} J_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) &= \sqrt{x} \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} \right)^{\frac{1}{3}} \left(x^{\frac{3}{2}} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{1}{\Gamma \left(\frac{1}{3} + 1 \right)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2^2} \left(\frac{2}{3} \right)^2 \frac{\left(x^{\frac{3}{2}} \right)^2}{\Gamma \left(\frac{1}{3} + 2 \right)} + \dots + \frac{(-1)^n}{n!} \frac{1}{2^{2n}} \left(\frac{2}{3} \right)^{2n} \frac{x^{\frac{3}{2} \cdot 2n}}{\Gamma \left(n + \frac{1}{3} + 1 \right)} + \dots \right] \\ &= \frac{\frac{2}{3} x}{\Gamma \left(\frac{1}{3} \right)} \left\{ 1 - \frac{x^3}{3 \cdot 4} + \frac{x^6}{2! 3^2 \cdot 7 \cdot 4} - \frac{x^9}{3! 3^3 \cdot 10 \cdot 7 \cdot 4 \cdot 1} + \dots \right. \\ &\quad \left. + \frac{(-1)^n x^{3n}}{n! 3^n [1+3n][1+3(n-1)] \dots 7 \cdot 4 \cdot 1} + \dots \right\} \end{aligned} \right.$$

On aura de même :

$$(79) \left\{ \begin{aligned} \sqrt{x} J_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} x^{\frac{3}{2}} \right) &= \frac{-3^{\frac{4}{3}}}{\Gamma \left(-\frac{1}{3} \right)} \left\{ 1 - \frac{x^3}{3 \cdot 2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{x^6}{2! 3^2 \cdot 5 \cdot 2} - \dots + \frac{(-1)^n x^{3n}}{n! 3^n [-1+3n][-1+3(n-1)] \dots 8 \cdot 5 \cdot 2} + \dots \right\} \end{aligned} \right.$$

L'intégrale générale de (75) est une combinaison linéaire de (78) et de (79).

Cherchons maintenant la solution de l'équation (75) par la deuxième méthode de résolution que nous avons développée à la page (52). Nous avons écrit l'intégrale générale $\Psi(x)$ de l'équation d'onde sous la forme (71) :

$$(80) \quad \Psi(x) = n_{11}(x) \Psi_0 + n_{12}(x) \Psi'_0 = \sum_{k=0}^{\infty} n_{11}^{2k}(x) \Psi_0 + \sum_{k=0}^{\infty} n_{12}^{2k+1}(x) \Psi'_0$$

où Ψ_0 et Ψ'_0 sont des constantes arbitraires, et les termes $n_{11}^{2k}(x)$, $n_{12}^{2k+1}(x)$ sont donnés par les formules (68) et (68').

D'après (68) et (68'), on peut exprimer les n_{11}^{2k} et n_{12}^{2k+1} comme des intégrales multiples (avec $f(x) = x$) :

$$(81) \quad n_{11}^{2k}(x) = (-1)^k \int_0^x dx \int_0^x x dx \int_0^x \dots \int_0^x dx \int_0^x x dx$$

$$(81') \quad n_{12}^{2k+1}(x) = (-1)^k \int_0^x dx \int_0^x x dx \int_0^x \dots \int_0^x x dx \int_0^x dx$$

Les $2k$ intégrations successives en (81) (respectivement $2k+1$ en (81')) s'effectuent facilement, et l'on arrive aux formules :

$$(82) \quad n_{11}^{2k}(x) = \frac{(-1)^k x^{3k}}{3k(3k-1) \dots 9 \cdot 8 \cdot 6 \cdot 5 \cdot 3 \cdot 2} = \frac{(-1)^k x^{3k}}{3^k \cdot k! \cdot 2 \cdot 5 \cdot 8 \dots (3k-1)}$$

$$(82') \quad n_{12}^{2k+1}(x) = \frac{(-1)^k x^{3k+1}}{(3k+1)3k \dots 7 \cdot 6 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 1} = \frac{(-1)^k x^{3k+1}}{3^k \cdot k! \cdot 1 \cdot 4 \cdot 7 \dots (3k+1)}$$

et l'on voit que (82) et (82') sont respectivement le $k^{\text{ième}}$ terme de la série (78) et (78'). Donc nous retrouvons, d'après cette dernière méthode, la solution connue de l'équation (75).

Si la fonction potentielle est donnée par un polynôme, ou si elle est développable en série de Taylor dans un intervalle (x_0, x') , l'intégrale de l'équation d'onde peut être représentée en série de puissance de x . Evidemment, nous retrouverons cette solution par la méthode précédente. Mais cette dernière méthode est applicable aussi dans les cas où l'intégrale de l'équation d'onde n'est pas développable en série de puissance de x . Si la fonction potentielle $U(x)$ est discontinue en un nombre fini de points, ou si elle se compose d'arcs de courbes différentes, en restant toujours bornée, les intégrales (68) et (68') gardent leurs sens, et la méthode précédente de résolution est toujours applicable.

Nous pouvons retrouver aussi la solution de l'équation (75) par la méthode des barrières (p. 36), mais les calculs sont beaucoup plus compliqués. Cette méthode des barrières

convient mieux pour chercher des solutions approximatives de l'équation d'onde.

Remarque 1. — Quand on étudie le problème de quantification de l'atome d'hydrogène en coordonnées polaires [1], l'équation d'onde se résout par séparation des variables. L'équation qui ne dépend que du rayon vecteur r a la forme suivante :

$$(83) \quad \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(A + \frac{2B}{r} + \frac{C}{r^2} \right) R = 0$$

où R est une fonction de r , et A, B, C sont des constantes. Quand l'énergie $E < 0$ la solution de (83) se présente sous

la forme $R = e^{-\frac{\rho}{2}} v(\rho)$, où $\rho = \frac{2r}{r_0}$, et $v(\rho)$ est un polynôme de ρ . Les valeurs propres de l'énergie forment un spectre discret. Pour $E > 0$ on trouve un spectre continu.

Nous pouvons chercher la solution de cette équation par la méthode de décomposition d'une barrière de potentiel.

Divisons en n parties un intervalle quelconque (r_0, r') de variation de r , et posons pour l'intervalle (r_k, r_{k+1}) :

$$a_k = \frac{2}{r_k}, b_k = A + \frac{2B}{r_k} + \frac{C}{r_k^2} \quad (k = 1, 2, \dots, n).$$

On peut faire correspondre une barrière élémentaire à chaque intervalle élémentaire. Dans le domaine (r_k, r_{k+1}) on peut considérer les coefficients de l'équation (83) comme constants a_k, b_k . Dans le même domaine l'intégrale totale de (83) sera :

$$(84) \quad R_k(r) = L_k e^{-\lambda_{k1} r} + M_k e^{+\lambda_{k2} r}$$

où L_k, M_k sont des constantes dont les valeurs changent d'une barrière élémentaire à l'autre, et λ_{k1} et λ_{k2} sont les racines de l'équation caractéristique $\sigma^2 + a_k \sigma + b_k = 0$. λ peut

être réel ou complexe, la méthode de résolution est également applicable. La forme de la solution (84) est la même comme (2) et l'on aura des conditions de continuité comme (4). Donc on fera les éliminations des L_k , M_k à l'aide de matrices comme (11), et l'on arrivera à une solution $R(r)$ semblable à (36). La discussion de la convergence se fait comme pour l'équation (1).

Nous pouvons aussi appliquer à cette équation la méthode de résolution donnée à la page (52). Posons $R(r_0) = R_0$ et $\left(\frac{dR}{dr}\right)_{r_0} = R'_0$, R_0 et R'_0 étant des constantes arbitraires. Les valeurs R_1 et R'_1 de R et de $\frac{dR}{dr}$ au point $r_0 + \Delta r_0$ seront calculées avec les formules :

$$(84') \quad \left\{ \begin{array}{l} R_1 = R_0 + \Delta r_0 R'_0 \\ R'_1 = R'_0 + \Delta r_0 R''_0 \\ \quad \quad \quad = -\Delta r_0 \left(A + \frac{2B}{r_0} + \frac{C}{r_0^2} \right) R_0 + \left(1 - \frac{2}{r_0} \Delta r_0 \right) R'_0. \end{array} \right.$$

La partie droite de la dernière égalité est trouvée en y remplaçant R'' par sa valeur, tirée de (83).

Par des formules analogues aux (84') on trouve les valeurs R_2 , R'_2 , etc... R_p , R'_p . Comme pour les équations (63) on exprimera R_p , R'_p en fonction de R_0 , R'_0 à l'aide d'une matrice de la forme de N (65). On donnera à la solution $R(r)$ de (83) une forme semblable à (71). Les discussions de la solution sont semblables à celles de la solution (71). Les points de rebroussement de l'ancienne mécanique sont des points ordinaires pour cette solution. On peut aussi choisir les valeurs initiales R_0 et R'_0 de façon que $R(r)$ soit finie au point $r = 0$.

Remarque II. — Après les considérations précédentes il est clair que les deux méthodes de résolution de l'équation d'onde, développées jusqu'ici, se généralisent sans difficulté

pour la résolution de l'équation différentielle linéaire ordinaire d'ordre n , dont les coefficients sont des fonctions connues de x . On doit employer des matrices presque diagonales à n lignes et à n colonnes au lieu des matrices à deux lignes et à deux colonnes. Toutes les considérations que nous avons faites dans le cas $n = 2$ s'appliquent aussi pour n quelconque.

CHAPITRE IV

1. Généralisation de la méthode des barrières sur la résolution de l'équation d'onde dans le cas général [10].

Nous avons trouvé la solution de l'équation d'onde dans le cas d'un seul corpuscule qui se meut sur une ligne droite dans un champ quelconque. L'idée essentielle de la méthode était la décomposition de la barrière donnée en barrières élémentaires successives. La même méthode de barrières nous permettra de chercher la solution de l'équation d'onde dans le cas général.

Nous commencerons par l'étude de l'équation d'onde pour deux corpuscules (x) et (y), de masses m_1 et m_2 , qui se meuvent sur une ligne droite OX, entre deux points d'abscisses x_0 et x' . Soient x et y les coordonnées correspondantes. L'énergie potentielle $F(x, y)$ du système se compose de l'énergie mutuelle des corpuscules, de la forme $F_{12}(x - y)$, fonction de leur distance mutuelle, et de l'énergie provenant du champ extérieur, donc de la forme $F_1(x) + F_2(y)$. Par conséquent :

$$(85) \quad F(x, y) = F_1(x) + F_2(y) + F_{12}(x - y)$$

et l'équation d'onde sera :

$$(86) \quad \frac{1}{m_1} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{8\pi^2}{h^2} [E - F(x, y)] \Psi = 0.$$

Quand le terme $F_{12}(x - y) = 0$, c'est-à-dire quand les corpuscules sont sans interaction, la fonction d'onde $\Psi(x, y)$ se décompose en produit de fonctions $\Psi_1(x)$ et $\Psi_2(y)$, $\Psi(x, y)$

$= \Psi_1(x)\Psi_2(y)$. La même décomposition a lieu aussi quand en plus le champ extérieur est constant ou nul.

L'équation (86) est une équation aux dérivées partielles du type elliptique. Prenons dans le plan de configuration des variables x et y un contour fermé C , qui limite une région P . L'intégrale $\Psi(x, y)$ de (86) est déterminée dans le domaine P d'une manière unique, si l'on se donne la suite des valeurs que prend Ψ sur le contour C (problème de Dirichlet).

L'intégrale Ψ de (86) est déterminée d'une autre façon dans le problème de choc de deux particules [11]. Si le potentiel F tend vers zéro quand les corpuscules sont très loin l'un de l'autre et de l'origine O (par exemple x et y sont très grands et négatifs), Ψ doit se réduire en une combinaison linéaire de deux ondes planes monochromatiques, dont les amplitudes tendent vers zéro. C'est cette dernière condition que nous imposerons à la fonction Ψ , quand le problème envisagé est un problème de choc.

Divisons l'intervalle x_0x' en n parties avec des points de division d'abscisses $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n = x'$. Supposons qu'à un instant donné (x) et (y) se trouve respectivement dans les intervalles (x_k, x_{k+1}) et (y_l, y_{l+1}) . Supposons aussi que la valeur du potentiel soit constante, égale à $F(x_k, y_l)$ tout le temps que (x) est dans l'intervalle (x_k, x_{k+1}) , et (y) dans l'intervalle (y_l, y_{l+1}) . Donc nous raisonnons comme si les corpuscules sont sans interaction et dans un champ extérieur constant pour des déplacements très petits. Mais dans un cas pareil la fonction d'onde $\Psi(x, y)$ se décompose en produit d'une fonction $\Psi_1(x)$ de x , et d'une autre $\Psi_2(y)$ de y . Remplaçons dans (86) $\Psi(x, y) = \Psi_1(x)\Psi_2(y)$ et divisons l'équation par $\Psi_1(x)\Psi_2(y)$. Puisque l'énergie potentielle est supposée constante, égale à $F(x_k, y_l) = F_1(x_k) + F_2(y_l) + F_{12}(x_k - y_l)$, le premier membre de l'équation se sépare en deux expressions : la première, fonction de x , et la seconde, fonction de y . Il suit que chacune d'elles sera égale

à une constante $\lambda_{k,l}$. Pour simplifier les calculs nous admettons dans la suite, que $\lambda_{k,l}$ garde une valeur constante λ pour tout choix des indices k, l . Nous verrons que la solution ainsi trouvée est une intégrale de (86) mais elle n'est pas l'intégrale générale de (86).

Donc l'équation (86) se décompose en deux équations ordinaires :

$$(87) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \Psi_1}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m_1}{h^2} [E - F_1(x_k) - F_{12}(x_k - y_l) - \lambda] \Psi_1 = 0 \\ \frac{d^2 \Psi_2}{dy^2} + \frac{8\pi^2 m_2}{h^2} [\lambda - F_2(y)] \Psi_2 = 0 \end{array} \right.$$

Nous avons attaché le terme mixte $F_{12}(x_k - y_l)$ à la première équation (87). A partir de (87) nous trouverons une intégrale de (86), qui remplit les conditions initiales, exigées dans le problème de choc de deux corpuscules. Si nous avons attaché le terme $F_{12}(x_k - y_l)$ à la seconde équation (87), nous trouverions, en effectuant toujours les calculs qui suivent, une intégrale de (86), qui remplit les mêmes conditions initiales dans le problème de choc.

L'intégrale générale de chacune des équations ordinaires (87) est une combinaison linéaire de deux ondes planes monochromatiques avec des amplitudes $A_{k,l}$, $B_{k,l}$ pour la première, et $C_{k,l}$, $D_{k,l}$ pour la seconde. Introduisons les notations :

$$(88) \quad \left\{ \begin{array}{l} \alpha_{k,l}^2 = \frac{8\pi^2 m_1}{h^2} [E - F_1(x_k) - F_{12}(x_k - y_l) - \lambda], \\ \beta_{k,l}^2 = \frac{8\pi^2 m_2}{h^2} [\lambda - F_2(y_l)] \end{array} \right.$$

Bien que β ne dépende pas de x , nous avons écrit $\beta_{k,l}$ au lieu de β_l puisque, si l'on considère λ comme fonction de x et de y , β dépendra de x .

Par $\Psi_{k,l}(x, y)$ nous indiquerons la fonction d'onde qui satisfait à l'équation (86) pour des déplacements de (x) et de (y) dans les intervalles (x_k, x_{k+1}) et (y_l, y_{l+1}) . Nous pouvons donc écrire :

$$(89) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Psi_{k,l}(x, y) \\ = (A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l}x} + B_{k,l} e^{i\alpha_{k,l}x})(C_{k,l} e^{-i\beta_{k,l}y} + D_{k,l} e^{i\beta_{k,l}y}) \\ (k, l = 1, 2, \dots n) \end{array} \right.$$

Pour des valeurs différentes des indices k et l nous aurons des solutions différentes, valable chacune quand x et y varient dans des intervalles déterminés. Puisqu'il y a deux indices indépendants, il y aura n^2 solutions de la forme (89). Les amplitudes $A_{k,l}$, $B_{k,l}$, $C_{k,l}$, $D_{k,l}$ sont des fonctions de x et de y , lesquelles nous considérons comme constantes dans les intervalles mentionnés plus haut.

Considérons la solution $\Psi_{k+1,l}(x, y)$. La configuration du système des deux corpuscules ne se distingue de la configuration correspondant à la solution $\Psi_{k,l}$ que par la position de (x) , qui est dans l'intervalle x_{k+1} , x_{k+2} , tandis que (y) n'a pas changé d'intervalle. Le corpuscule (x) passe de l'intervalle x_k , x_{k+1} , où le potentiel a une valeur constante dans l'intervalle x_{k+1} , x_{k+2} , où le potentiel a une autre valeur constante. Les choses se passent comme si l'on avait un passage de corpuscules à travers une barrière de potentiel. Quand le corpuscule (x) se déplace, il a à traverser une suite de barrières de hauteur constante chacune. Cette hauteur dépend, naturellement, de la position de (x) et de (y) . Exactement pour la même raison nous pouvons penser que (y) traverse une suite de barrières élémentaires rectangulaires de hauteur constante, fonction de la position de (x) et de (y) . Il est clair que les raisonnements faits pour une suite de barrières rectangulaires (p. 13) peuvent être appliqués ici. Quand le corpuscule (x) change de barrière, à la limite de deux barrières voisines la fonction d'onde $\Psi_{k,l}(x, y)$ et sa dérivée partielle par rapport à x doivent être continues, en considérant y comme constant.

Par conséquent on peut écrire les deux conditions suivantes :

$$(90) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Psi_{k,l}(x_{k+1}, y_l) = \Psi_{k+1,l}(x_{k+1}, y_l) \\ \left(\frac{\partial \Psi_{k,l}}{\partial x} \right)_{x_{k+1}, y_l} = \left(\frac{\partial \Psi_{k+1,l}}{\partial x} \right)_{x_{k+1}, y_l} \end{array} \right.$$

Pour la même raison $\Psi_{k,l}$ et $\frac{\partial \Psi_{k,l}}{\partial y}$ doivent être continues par rapport à y . On aura deux conditions comme (90), exprimant la continuité par rapport à y .

Nous donnerons la forme explicite suivante aux conditions (90), en tenant compte de (89) :

$$(91) \left\{ \begin{array}{l} (A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l} x_{k+1}} + B_{k,l} e^{i\alpha_{k,l} x_{k+1}}) \\ (C_{k,l} e^{-i\beta_{k,l} y_l} + D_{k,l} e^{i\beta_{k,l} y_l}) \\ \quad = (A_{k+1,l} e^{-i\alpha_{k+1,l} x_{k+1}} + B_{k+1,l} e^{i\alpha_{k+1,l} x_{k+1}}) \\ \quad (C_{k+1,l} e^{-i\beta_{k+1,l} y_l} + D_{k+1,l} e^{i\beta_{k+1,l} y_l}) \\ i\alpha_{k,l} (-A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l} x_{k+1}} + B_{k,l} e^{i\alpha_{k,l} x_{k+1}}) \\ (C_{k,l} e^{-i\beta_{k,l} y_l} + D_{k,l} e^{i\beta_{k,l} y_l}) \\ \quad = i\alpha_{k+1,l} (-A_{k+1,l} e^{-i\alpha_{k+1,l} x_{k+1}} + B_{k+1,l} e^{i\alpha_{k+1,l} x_{k+1}}) \\ \quad (C_{k+1,l} e^{-i\beta_{k+1,l} y_l} + D_{k+1,l} e^{i\beta_{k+1,l} y_l}) \end{array} \right.$$

Les deux conditions (91) sont linéaires par rapport aux amplitudes $A_{k,l}$, $B_{k,l}$, $A_{k+1,l}$, $B_{k+1,l}$. Elles permettent d'exprimer $A_{k+1,l}$ et $B_{k+1,l}$ en fonction de $A_{k,l}$, $B_{k,l}$. Divisons les deux égalités (91) par le dernier facteur de leurs parties droites, et introduisons la notation :

$$(92) \quad c_{k,k+m,l} = \frac{C_{k,l} e^{-i\beta_{k,l} y_l} + D_{k,l} e^{i\beta_{k,l} y_l}}{C_{k+m,l} e^{-i\beta_{k+m,l} y_l} + D_{k+m,l} e^{i\beta_{k+m,l} y_l}}.$$

Les équations (91) prendront la forme :

$$(93) \left\{ \begin{array}{l} c_{k,k+1,l} (A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l} x_{k+1}} + D_{k,l} e^{i\alpha_{k,l} x_{k+1}}) \\ \quad = A_{k+1,l} e^{-i\alpha_{k+1,l} x_{k+1}} + B_{k+1,l} e^{i\alpha_{k+1,l} x_{k+1}} \\ c_{k,k+1,l} \alpha_{k,l} (A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l} x_{k+1}} - D_{k,l} e^{i\alpha_{k,l} x_{k+1}}) \\ \quad = \alpha_{k+1,l} (A_{k+1,l} e^{-i\alpha_{k+1,l} x_{k+1}} - B_{k+1,l} e^{i\alpha_{k+1,l} x_{k+1}}) \end{array} \right.$$

Dans cette forme la différence entre les équations (93) et (4) est seulement dans le facteur $c_{k,k+1,l}$. Par conséquent les relations entre $A_{k+1,l}$, $B_{k+1,l}$ et $A_{k,l}$, $B_{k,l}$ comme (9) auront la forme :

$$(94) \quad \begin{vmatrix} A_{k+1,l} \\ B_{k+1,l} \end{vmatrix} = c_{k,k+1,l} M_{k,l} \begin{vmatrix} A_{k,l} \\ B_{k,l} \end{vmatrix}.$$

où $M_{k,l}$ est une matrice à deux lignes et à deux colonnes, correspondant à la matrice M_j (16), donc on peut l'écrire facilement :

$$(95) \quad M_{k,l} = \begin{vmatrix} e^{i\Delta x_{\Delta k,l} x_k - \frac{\Delta x_{\Delta k,l}}{2\alpha_{k,l}}} & \frac{\Delta x_{\Delta k,l}}{2\alpha_{k,l}} e^{2ix_{k,l} x_k} \\ \frac{\Delta x_{\Delta k,l}}{2\alpha_{k,l}} e^{-2ix_{k,l} x_k} & e^{-i\Delta x_{\Delta k,l} x_k - \frac{\Delta x_{\Delta k,l}}{2\alpha_{k,l}}} \end{vmatrix}$$

$$\Delta x_{\Delta k,l} = x_{k+1,l} - x_{k,l} = \left(\frac{\partial x_{k,l}}{\partial x} \right)_{x_k} \Delta x_k$$

L'indice Δk indique que la variation de α est causée par la variation de x seulement, et y reste constant. La relation vectorielle (94) est vraie pour $k = 1, 2, \dots, n$. En l'appliquant pour des valeurs successives de k , on trouvera, comme dans le problème à une seule dimension :

$$(96) \quad \left\{ \begin{vmatrix} A_{k+\rho,l} \\ B_{k+\rho,l} \end{vmatrix} = c_{k+\rho-1,k+\rho,l} c_{k+\rho-2,k+\rho-1,l} \dots c_{k,k+1,l} M_{k+\rho,l} M_{k+\rho-1,l} \dots M_{k,l} \begin{vmatrix} A_{k,l} \\ B_{k,l} \end{vmatrix} \right.$$

Le produit des facteurs c dans la partie droite de la dernière égalité se calcule en tenant compte de (92). Ce produit des facteurs se simplifie facilement, et l'on trouve :

$$(97) \quad c_{k+\rho-1,k+\rho,l} c_{k+\rho-2,k+\rho-1,l} \dots c_{k,k+1,l} = c_{k,k+\rho,l}.$$

D'un autre côté, comme c'est déjà fait, le produit de matrices $M_{k+j,l}$ dans (96) donne une matrice, qui se calcule, évidemment, comme M_k (12'). Dans cette matrice-produit, que nous indiquerons par $M_{k+\rho,k,l}$, les sommes dans ses éléments seront étendues de x_k à x_{k+1} , y restant constant. On aura finalement :

$$(98) \quad \begin{vmatrix} A_{k+\rho,l} \\ B_{k+\rho,l} \end{vmatrix} = c_{k,k+\rho,l} M_{k+\rho,k,l} \begin{vmatrix} A_{k,l} \\ B_{k,l} \end{vmatrix}$$

Nous pouvons donner aux conditions de continuité par rapport à y une forme explicite, comme (91). Ces conditions donneront deux relations linéaires entre $C_{k,l+1}$, $D_{k,l+1}$ et $C_{k,l}$, $D_{k,l}$, que l'on peut écrire sous la forme vectorielle suivante (comme (94)) :

$$(99) \quad \begin{vmatrix} C_{k,l+1} \\ D_{k,l+1} \end{vmatrix} = a_{k,l+1,l} N_{k,l} \begin{vmatrix} C_{k,l} \\ D_{k,l} \end{vmatrix}$$

où le facteur $a_{k,l+1,l}$ est composé de façon analogue à (92) :

$$(100) \quad a_{k,l+\sigma,l} = \frac{A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l} x_k} + B_{k,l} e^{i\alpha_{k,l} x_k}}{A_{k,l+\sigma} e^{-i\alpha_{k,l+\sigma} x_k} + B_{k,l+\sigma} e^{i\alpha_{k,l+\sigma} x_k}}$$

et $N_{k,l}$ est une matrice à deux lignes et à deux colonnes, comme $M_{k,l}$:

$$(101) \quad N_{k,l} = \begin{vmatrix} e^{i\Delta\beta_{k,\Delta} y_l - \frac{\Delta\beta_{k,\Delta} l}{2\beta_{k,l}}} & \frac{\Delta\beta_{k,\Delta} l}{2\beta_{k,l}} e^{2i\beta_{k,l} y_l} \\ \frac{\Delta\beta_{k,\Delta} l}{2\beta_{k,l}} e^{2i\beta_{k,l} y_l} & e^{-i\Delta\beta_{k,\Delta} y_l - \frac{\Delta\beta_{k,\Delta} l}{2\beta_{k,l}}} \end{vmatrix}$$

$$\Delta\beta_{k,\Delta} l = \beta_{k,l+1} - \beta_{k,l} = \left(\frac{\partial\beta_{k,l}}{\partial y} \right)_{y_l} \Delta y_l.$$

L'élimination des amplitudes successives C , D de $C_{k,l}$, $D_{k,l}$ à $C_{k,l+\sigma}$, $D_{k,l+\sigma}$ donne la relation :

$$(102) \quad \begin{vmatrix} C_{k,l+\sigma} \\ D_{k,l+\sigma} \end{vmatrix} = a_{k,l+\sigma,l} N_{k,l+\sigma,l} \begin{vmatrix} C_{k,l} \\ D_{k,l} \end{vmatrix}$$

où $N_{k,l+\sigma,l}$ est la matrice produit des $N_{k,l}$ et $a_{k,l+\sigma,l}$ est le facteur qui reste du produit des a dans (99).

Quand $n \rightarrow \infty$, les sommes dans les termes de $M_{k+\rho,k,l}$ et

de $N_{k,l+\sigma,l}$ se transforment en intégrales définies : dans les termes de $M_{k+\rho,k,l}$ les intégrations sont faites par rapport à x , dans ceux de $N_{k,l+\sigma,l}$, par rapport à y . La question de convergence des sommes est la même comme dans le cas d'une seule dimension, pour la matrice $M(12')$. Si la fonction $F(x,y)$ est continue par rapport à x et à y , et bornée dans l'intervalle x_0x' , on peut trouver une matrice M_x , qui est majorante pour $M_{k,l}$, et dont la puissance quelconque est finie, et une matrice N_y , majorante pour $N_{k,l}$, avec des propriétés semblables. Donc les matrices $M_{k+\rho,k,l}$ et $N_{k,l+\sigma,l}$ sont finies dans l'intervalle x_0x' .

Considérons les intégrales dans les termes des matrices $M_{k+\rho,k,l}$ et $N_{k,l+\sigma,l}$ comme fonctions de leurs limites supérieures. Les éléments $m_{\alpha\beta}$ et $n_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2$) de M et de N seront des fonctions connues de x et de y , puisqu'ils se calculent exactement comme les éléments $m_{\alpha\beta}$ (34) de la matrice $M(12')$. La fonction d'onde $\Psi(x,y)$ sera donc, quand x varie dans l'intervalle $(x_{k+\rho}, x_{k+\rho+1})$, et y dans l'intervalle $(y_{l+\sigma}, y_{l+\sigma+1})$:

$$(103) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Psi_{k+\rho,l+\sigma}(x,y) \\ = A_{k+\rho,l+\sigma} e^{-i\alpha_{k+\rho,l+\sigma}x} + B_{k+\rho,l+\sigma} e^{i\alpha_{k+\rho,l+\sigma}x} \\ \quad (C_{k+\rho,l+\sigma} e^{-i\beta_{k+\rho,l+\sigma}y} + D_{k+\rho,l+\sigma} e^{i\beta_{k+\rho,l+\sigma}y}). \end{array} \right.$$

Dans la formule (89) et les suivantes nous avons indiqué par des indices k et l des positions initiales quelconques des corpuscules (x) et (y). Afin de simplifier les écritures, et sans restreindre la généralité nous pouvons fixer les positions initiales de (x) et de (y) par des indices 0,0. Toutes les formules de (87) à (103) seront conservées, en y mettant partout $k=l=0$. Dans la suite nous nous servirons de ces formules, ainsi modifiées. En particulier la formule (103) deviendra :

$$(103') \quad \left\{ \begin{aligned} \psi_{\rho,\sigma}(x,y) &= (A_{\rho,\sigma} e^{-i\alpha_{\rho,\sigma}x} + B_{\rho,\sigma} e^{i\alpha_{\rho,\sigma}x}) \\ &\quad (C_{\rho,\sigma} e^{-i\beta_{\rho,\sigma}y} + D_{\rho,\sigma} e^{i\beta_{\rho,\sigma}y}). \end{aligned} \right.$$

Nous pouvons maintenant exprimer les amplitudes $A_{\rho,\sigma}$, $B_{\rho,\sigma}$ de (103') en fonction de $A_{0,\sigma}$, $B_{0,\sigma}$ à l'aide de (98) :

$$(104) \quad \left\{ \begin{aligned} \psi_{\rho,\sigma}(x,y) &= [(m_{11}A_{0,\sigma} + m_{12}B_{0,\sigma})e^{-i\alpha_{\rho,\sigma}x} \\ &\quad + (m_{21}A_{0,\sigma} + m_{22}B_{0,\sigma})e^{i\alpha_{\rho,\sigma}x}] \\ &\quad \times \frac{C_{0,\sigma}e^{-i\beta_{0,\sigma}y\tau} + D_{0,\sigma}e^{i\beta_{0,\sigma}y\tau}}{C_{\rho,\sigma}e^{-i\beta_{\rho,\sigma}y\tau} + D_{\rho,\sigma}e^{i\beta_{\rho,\sigma}y\tau}} (C_{\rho,\sigma}e^{-i\beta_{\rho,\sigma}y} + D_{\rho,\sigma}e^{i\beta_{\rho,\sigma}y}). \end{aligned} \right.$$

Le dernier facteur du deuxième terme de (104) se simplifie avec le dénominateur de la fraction, puisque y devient égale à y_τ quand les intervalles tendent vers zéro. Les éléments m_{11} , ..., m_{22} de la matrice $M_{\rho,0,0}$ sont des fonctions de x_ρ , puisque y garde la valeur constante y_τ .

Faisons maintenant l'élimination des amplitudes C et D de (104) à l'aide de (102). On trouve :

$$(105) \quad \left\{ \begin{aligned} \psi_{\rho,\sigma}(x,y) &= [(m_{11}A_{0,\sigma} + m_{12}B_{0,\sigma})e^{-i\alpha_{\rho,\sigma}x} \\ &\quad + (m_{21}A_{0,\sigma} + m_{22}B_{0,\sigma})e^{i\alpha_{\rho,\sigma}x}] \\ &\quad \times [(n_{11}C_{0,0} + n_{12}D_{0,0})e^{-i\beta_{0,\sigma}y\tau} \\ &\quad + (n_{21}C_{0,0} + n_{22}D_{0,0})e^{i\beta_{0,\sigma}y\tau}] \frac{A_{0,0}e^{-i\alpha_{0,0}x_0} + B_{0,0}e^{i\alpha_{0,0}x_0}}{A_{0,\sigma}e^{-i\alpha_{0,\sigma}x_0} + B_{0,\sigma}e^{i\alpha_{0,\sigma}x_0}} \end{aligned} \right.$$

où n_{11} , ..., n_{22} sont des fonctions connues de y (x dans n_{11} , ... garde la valeur constante x_0).

Si on élimine les $C_{\rho,\sigma}$, $D_{\rho,\sigma}$ de (103) à l'aide de (102) et (100), et les $A_{\rho,0}$, $B_{\rho,0}$ à l'aide de (98) et (92), on trouvera cette deuxième forme de (103') :

$$(106) \left\{ \begin{aligned} \Psi_{\rho,\sigma}(x,y) = & [(m_{11}A_{0,0} + m_{12}B_{0,0})e^{-i\alpha_{\rho,0}x_0} \\ & + (m_{21}A_{0,0} + m_{22}B_{0,0})e^{i\alpha_{\rho,0}x_0}] \\ & \times [(n_{11}C_{\rho,0} + n_{12}D_{\rho,0})e^{-i\beta_{\rho,\sigma}y} \\ & + (n_{21}C_{\rho,0} + n_{22}D_{\rho,0})e^{i\beta_{\rho,\sigma}y}] \frac{C_{,0}e^{-i\beta_{0,0}y_0} + D_{0,0}e^{i\beta_{0,0}y_0}}{C_{\rho,0}e^{-i\beta_{\rho,0}y_0} + D_{\rho,0}e^{i\beta_{\rho,0}y_0}}. \end{aligned} \right.$$

Dans les termes $m_{11}, \dots, m_{22}$ les intégrations sont effectuées par rapport à x ($y=y_0$), et dans les $n_{11}, \dots, n_{22}$, par rapport à y ($x=x_\rho$).

Nous devons faire une remarque sur les points singuliers de la fonction potentielle $F(x, y)$, et sur les points où les grandeurs α et β (88) s'annulent). Ces derniers points correspondent aux points de rebroussement de l'ancienne mécanique pour le problème à un corpuscule. Dans une région P , qui entoure ces points, la fonction $\Psi(x, y)$ est sensiblement linéaire par rapport à x et à y , et l'on peut faire des considérations analogues à celles de la page 51. On doit accorder sur la limite de P la fonction linéaire avec la fonction d'onde à l'extérieur de P .

Les points singuliers de la fonction potentielle $F(x, y)$ sont aussi des points singuliers pour les fonctions $\Psi(x, y)$ (104) et (105). On peut employer ici aussi une méthode à l'aide de laquelle on peut construire une solution $\Psi(x, y)$ qui est nulle aux points singuliers de $F(x, y)$, comme cela a été fait dans le problème à un corpuscule (p. 52) : on peut prendre comme paramètres arbitraires la valeur de la fonction d'onde Ψ et de $\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \frac{\partial \Psi}{\partial y}$ dans un point quelconque, et de proche en proche on peut trouver les valeurs de ces grandeurs dans les autres points. Nous n'entrerons pas en détail sur cette question, puisque les calculs sont plus longs.

2. Vérification que la fonction $\Psi_{k,l}(x, y)$ satisfait à l'équation d'onde.

Pour construire la fonction $\Psi_{k,l}$, nous avons décomposé l'intervalle $x_0 x'$ (le domaine des variables x et y) en petits domaines élémentaires (x_k, x_{k+1}) et (y_l, y_{l+1}) ($k, l = 1, 2, \dots, n$). $\Psi_{k,l}$ est la solution de l'équation dans le domaine ci-dessus. On peut considérer que la fonction $\Psi_{k,l}$ représente une portion d'une certaine surface $\Psi(x, y)$. $\Psi(x, y)$ est composée de ces petites surfaces $\Psi_{k,l}$, collées sur leurs bords de façon à former une surface continue. Cela est vrai pour un choix quelconque des intervalles, aussi à la limite, quand les intervalles tendent vers zéro. Sans vérifier nous sommes sûr que $\Psi(x, y)$ est solution de l'équation d'onde, puisqu'elle est construite de manière à la satisfaire. Cependant nous le vérifierons par des calculs. Ici aussi la différentiation directe de la formule finale (105) est difficile, et nous ferons la vérification comme pour le problème linéaire, à savoir : nous calculerons les valeurs de Ψ pour trois valeurs voisines de x ($x_k, x_{k+1} = x_k + \Delta x_k, x_{k+2} = x_k + 2\Delta x_k$) et y fixé, égal à y_l . Avec ces valeurs nous formerons la dérivée $\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right)_{x_k, y_l}$ d'après la formule (38). De même nous trouverons $\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}\right)_{x_k, y_l}$, et la vérification sera immédiate.

La formule (103) donne :

$$(107) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Psi_{k,l}(x_k, y_l) = (A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l} x_k} + B_{k,l} e^{i\alpha_{k,l} x_k}) \\ \quad \quad \quad (C_{k,l} e^{-i\beta_{k,l} y_l} + D_{k,l} e^{i\beta_{k,l} y_l}) \\ \Psi_{k,l}(x_{k+1}, y_l) = (A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l}(x_k + \Delta x_k)} + B_{k,l} e^{i\alpha_{k,l}(x_k + \Delta x_k)}) \\ \quad \quad \quad (C_{k,l} e^{-i\beta_{k,l} y_l} + D_{k,l} e^{i\beta_{k,l} y_l}) \end{array} \right.$$

D'après (39), en gardant les infiniment petits de second ordre on a :

$$(108) \left\{ \begin{aligned} \Psi_{k,l}(x_{k+1}, y_l) &= [A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l} x_k} (1 - i\alpha_{k,l} \Delta x_k - \frac{1}{2} \alpha_{k,l}^2 \Delta x_k^2) \\ &\quad + B_{k,l} e^{i\alpha_{k,l} x_k} (1 + i\alpha_{k,l} \Delta x_k - \frac{1}{2} \alpha_{k,l}^2 \Delta x_k^2)] \\ &\quad \times [C_{k,l} e^{-i\beta_{k,l} y_l} + D_{k,l} e^{i\beta_{k,l} y_l}]. \end{aligned} \right.$$

De (103) on obtient :

$$\begin{aligned} \Psi_{k,l}(x_{k+2}, y_l) &= \Psi_{k+1,l}(x_{k+2}, y_l) \\ &= (A_{k+1,l} e^{-i\alpha_{k+1,l} x_{k+2}} + B_{k+1,l} e^{i\alpha_{k+1,l} x_{k+2}}) \\ &\quad (C_{k+1,l} e^{-i\beta_{k+1,l} y_l} + D_{k+1,l} e^{i\beta_{k+1,l} y_l}). \end{aligned}$$

Remplaçons maintenant $A_{k+1,l}$, $B_{k+1,l}$ par $A_{k,l}$, $B_{k,l}$ à l'aide de (94), x_{k+2} par $x_k + 2\Delta x_k$, et développons l'expression précédente suivant les puissances de Δx_k , en gardant les termes en Δx_k^2 . Le calcul, un peu plus long, comme pour (40'') donne ;

$$(109) \left\{ \begin{aligned} \Psi_{k+1,l}(x_k + 2\Delta x_k, y_l) \\ &= [A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l} x_k} (1 - 2i\alpha_{k,l} \Delta x_k - 2\alpha_{k,l}^2 \Delta x_k^2) \\ &\quad + B_{k,l} e^{i\alpha_{k,l} x_k} (1 + 2i\alpha_{k,l} \Delta x_k - 2\alpha_{k,l}^2 \Delta x_k^2)] \\ &\quad [C_{k,l} e^{-i\beta_{k,l} y_l} + D_{k,l} e^{i\beta_{k,l} y_l}]. \end{aligned} \right.$$

Avec les trois expressions (107), (108), (109) on forme facilement la dérivée $\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right)_{x_k, y_l}$ d'après la formule (38). On trouve :

$$(110) \left\{ \begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right)_{x_k, y_l} &= (A_{k,l} e^{-i\alpha_{k,l} x_k} + B_{k,l} e^{i\alpha_{k,l} x_k}) \\ &\quad (C_{k,l} e^{-i\beta_{k,l} y_l} + D_{k,l} e^{i\beta_{k,l} y_l}) (-\alpha_{k,l}^2) \\ &= \Psi_{k,l}(x_k, y_l) (-\alpha_{k,l}^2). \end{aligned} \right.$$

Tout à fait de la même manière on aboutira à la formule :

$$(111) \quad \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2}\right)_{x_k, y_l} = \Psi_{k,l}(x_k, y_l) (-\beta_{k,l}^2).$$

En se souvenant des formules (88) on voit facilement que l'équation (80) est satisfaite par les fonctions $\Psi(x, y)$ (104) et (105).

3. Détermination des constantes arbitraires.

Le problème envisagé à deux corpuscules dans l'espace à une dimension peut être interprété comme un problème à un corpuscule représentatif dans l'espace de configuration à deux dimensions, un plan. Dans ce plan nous choisissons les deux axes de coordonnées perpendiculaires OX et OY.

Considérons la fonction $\Psi_{\rho,\sigma}(x, y)$ (105) Pour une valeur fixe de l'indice σ , (105) sera la solution de l'équation d'onde, valable dans la bande horizontale entre les droites d'équation $y = y_\sigma$ et $y = y_{\sigma+1}$. Si nous connaissons les valeurs numériques de $A_{0,0}$, $B_{0,0}$, $C_{0,0}$, $D_{0,0}$ et celles de $A_{0,\sigma}$, $B_{0,\sigma}$, les valeurs de la fonction d'onde Ψ seront connues dans la bande choisie. Pour avoir les valeurs de Ψ dans la bande suivante, entre les droites $y = y_{\sigma-1}$ et $y = y_\sigma$, on doit connaître aussi les valeurs numériques de $A_{0,\sigma-1}$ et $B_{0,\sigma-1}$. On voit que (105) contient une suite de paramètres indéterminés $A_{0,\sigma}$, $B_{0,\sigma}$ ($\sigma = 1, 2, \dots$). Mais puisque l'équation (105) les contient linéairement au numérateur et au dénominateur, on peut diviser ces derniers par $A_{0,\sigma}$ (supposé différent de zéro), et l'on aura comme paramètre arbitraire leur rapport $b_{0,\sigma} = \frac{B_{0,\sigma}}{A_{0,\sigma}}$ (Ψ est une fonction homographique par rapport à $b_{0,\sigma}$). Donc dans toutes les bandes horizontales que nous avons définies plus haut, la solution Ψ contient un paramètre arbitraire $b_{0,\sigma}$, ou bien, dans l'ensemble de ces bandes, une suite de paramètres arbitraires. Leurs valeurs doivent être fixées, pour qu'on puisse calculer les valeurs de Ψ pour tout x et y .

Considérons la bande horizontale entre les droites $y = y_\sigma$ et $y = y_{\sigma+1}$. Avec cela les valeurs des éléments $m_{11}, \dots, m_{22}$ de la matrice $M_{\rho,0,0}$, qui entrent dans (105), seront connues

comme des fonctions de x_ρ (limite supérieure des intégrales dans les éléments $m_{11}, \dots m_{22}$). Puisque nous disposons dans la bande ci-dessus indiquée d'un paramètre arbitraire $b_{0,\sigma}$, nous pouvons le choisir de façon que $\Psi_{\rho,\sigma}(x_\rho, y_\sigma)$ prenne une valeur donnée que nous indiquerons par g_σ . De la même manière nous pouvons choisir le paramètre $b_{0,\sigma-1}$ dans la bande horizontale entre $y = y_\sigma$ et $y = y_{\sigma-1}$ de façon que $\Psi_{\rho,\sigma-1}(x_\rho, y_{\sigma-1}) = g_{\sigma-1}$, où $g_{\sigma-1}$ est une autre valeur donnée, voisine de g_σ . Donc nous pouvons trouver pour les paramètres arbitraires $b_{0,\sigma}$ ($\sigma = 1, 2, \dots$) des valeurs telles que la fonction Ψ prenne une suite de valeurs données $g_\sigma, g_{\sigma-1}, \dots$ pour une valeur fixe de x . A la limite, quand les intervalles de division $\Delta x, \Delta y$ tendent vers zéro, la suite de valeurs $g_0, g_1, g_2, \dots$ peut être considérée comme la suite des valeurs d'une fonction $g(y)$ de y pour $y = y_0, y_1, y_2, \dots$. Donc si nous pouvons déterminer de la façon indiquée les paramètres $b_{0,\sigma}$, la fonction $\Psi(x, y)$, solution de l'équation d'onde se confondra avec une fonction donnée de y , pour une valeur donnée de $x = x_\rho$.

$$(112) \quad \Psi(x_\rho, y) = g(y).$$

Les opérations esquissées sont faciles à effectuer. On doit écrire pour la bande horizontale entre y_σ et $y_{\sigma+1}$ la condition :

$$(113) \quad \Psi_{\rho,\sigma}(x_\rho, y_\sigma) = g(y_\sigma) = g_\sigma (\sigma = 1, 2, \dots).$$

A l'aide de (105) on voit que la condition précédente exprime g_σ comme une fonction homographique du paramètre $b_{0,\sigma}$, et l'on en tire la valeur de $b_{0,\sigma}$.

La formule trouvée donne en principe la solution générale pour les paramètres b . Evidemment, il n'est pas très facile de discuter, dans le cas général, si cette formule peut être

employée pour toutes valeurs données de y_σ , c'est-à-dire si les $b_{0,\sigma}$ auront des valeurs finies pour tout g_σ donné. On ne doit jamais, par exemple, choisir le module de l'un des paramètres $b_{0,\sigma}$ égal à 1, $|b_{0,\sigma}| = 1$, parce que si cela se réalise, le dénominateur dans la formule (105) aurait pu s'annuler pour certaines valeurs des variables.

Nous appliquerons la formule (105) en général pour trouver une solution approximative de l'équation d'onde. Dans le cas où la fonction potentielle est lentement variable, nous avons déjà vu pour le problème à une dimension que des quatre termes m (34) de la matrice M (12') on ne doit retenir en première approximation que les deux éléments m_{11}^0 et m_{22}^0 , donnés par (25) et (25'). En supposant que $F(x, y)$ est une fonction lentement variable, nous ne retiendrons, ici aussi, que les éléments m_{11}^0 et m_{22}^0 de la diagonale principale de la matrice $M_{p,0,0}$. De même parmi les termes $n_{11}, \dots, n_{22}$ on ne gardera que n_{11}^0 et n_{22}^0 . La formule simplifiée que nous trouverons ainsi pour les $b_{0,\sigma}$, en y remplaçant les valeurs approximatives des m et des n montre que les $b_{0,\sigma}$ sont en général des fonctions lentement variables de x et de y . Dans le cas où l'interaction mutuelle des deux corpuscules (x) et (y) peut être négligée, on sait que la résolution de l'équation d'onde se fait par séparation des variables. Nous pouvons facilement retrouver ce cas de la formule (105) si le terme F_{12} dans la fonction potentielle est négligeable, puisque dans ce cas les conditions de continuité (90) sont vérifiées pour $A_{0,0} = A_{0,1} = A_{0,2} = \dots$ et $B_{0,0} = B_{0,1} = B_{0,2} = \dots$. Nous admettrons qu'en première approximation nous pouvons prendre dans la formule (105) :

$$(114) \quad \left\{ \begin{array}{l} A_{0,0} = A_{0,1} = \dots = A_{0,\sigma} = A \\ B_{0,0} = B_{0,1} = \dots = B_{0,\sigma} = B \end{array} \right.$$

Cette convention simplifie beaucoup les calculs qui sui-

vront dans les cas pratiques. Ce choix des amplitudes A et B indique seulement que notre fonction Ψ prend, pour $x = x_\rho$, une suite de valeurs qui sont les valeurs d'une fonction $g(y)$ lentement variable. Inversement, si l'on met en (107) A et B d'après (114), on trouvera cette suite de valeurs. Donc nous accepterons que (114) existe. Les conditions (114) sont équivalentes à la condition unique :

$$(115) \quad b_{0,0} = b_{0,1} = \dots = b_{0,\sigma} = b.$$

Avec cette convention nous écrivons la solution (105) sous cette forme :

$$(116) \quad \left\{ \begin{aligned} \Psi_{\rho,\sigma}(x, y) = & (m_{11} + bm_{22})e^{-ix_\rho, \sigma x} \\ & + (m_{21} + m_{22}b)e^{i\alpha_\rho, \sigma x} [(n_{11}C_{0,0} + n_{12}D_{0,0})e^{-i\beta_{0,\sigma}y} \\ & + n_{21}(C_{0,0} + n_{22}D_{0,0})e^{i\beta_{0,\sigma}y}] \frac{Ae^{-i\alpha_{0,0}x_0} + Be^{i\alpha_{0,0}x_0}}{e^{-i\alpha_{0,\sigma}x_0} + be^{i\alpha_{0,\sigma}x_0}} \end{aligned} \right.$$

Quand les intervalles de division Δx , Δy tendent vers zéro, tous les termes en (116), qui dépendent de x_ρ et de y_σ deviennent des fonctions continues de x et de y . Nous pouvons donc donner à (116) une forme finale, en supprimant les indices ρ et σ :

$$(117) \quad \left\{ \begin{aligned} \Psi(x, y) \\ = & [(m_{11} + bm_{12})e^{-i\alpha(x,y)x} + (m_{21} + m_{22}b)e^{i\alpha(x,y)x}] \\ & [(n_{11}C_{0,0} + n_{12}D_{0,0})e^{-i\beta(x_0,y)y} + (n_{21}C_{0,0} \\ & + n_{22}D_{0,0})e^{i\beta(x_0,y)y}] \frac{Ae^{-i\alpha(x_0,y_0)x_0} + Be^{i\alpha(x_0,y_0)x_0}}{e^{-i\alpha(x_0,y)x_0} + be^{i\alpha(x_0,y)x_0}} \end{aligned} \right.$$

Cette formule permet de calculer la valeur de Ψ pour toute valeur de x et de y . On ne doit pas oublier aussi que les éléments m en (117) sont des fonctions de x et de y ; $m_{11}(x, y)$, ..., tandis que les n sont des fonctions de y seulement, et $x = x_0$; $n_{11}(x_0, y)$, ...

Admettons maintenant que le problème étudié soit un pro-

blème de choc, c'est-à-dire que pour des valeurs très grandes de x et de y le potentiel $F(x, y)$ (85) tend vers zéro. Dans ce cas les termes α et β , d'après (116), deviennent des constantes. D'un autre côté nous avons vu pour le problème linéaire que la matrice $M(12')$ devient une matrice unité dans un domaine, où le potentiel est constant (ou nul). Puisque les matrices $M_{k+\rho, k, l}$ (98) et $N_{k, l+\tau, l}$ (102) ont la même forme que $M(12')$, on voit facilement qu'avec l'hypothèse que nous avons faite sur $F(x, y)$, on a $m_{41} \sim m_{22} \sim 1$, tandis que $m_{12} \sim m_{21} \sim 0$, et de même $n_{41} \sim n_{22} \sim 1$, $n_{12} \sim n_{21} \sim 0$ pour des valeurs très grandes de x et de y . En se rapportant à la formule (105) on voit que chacun des crochets représentera comme forme asymptotique une combinaison linéaire de deux ondes planes monochromatiques, et le dernier facteur (la fraction) devient constant. Par conséquent *le choix (114) des amplitudes A et B détermine une telle intégrale Ψ de l'équation d'onde, qui est exigée dans le problème de choc*, c'est-à-dire que ses valeurs asymptotiques décrivent un mouvement uniforme des deux corpuscules.

Prenons maintenant la forme (106) que nous avons donnée à la solution (103) de l'équation d'onde. Il est clair que l'on peut faire sur cette formule des considérations analogues à celles faites pour la formule (105). On aura les valeurs de Ψ en tout point (x_ρ, y_σ) si l'on sait les valeurs des constantes $C_{\rho,0}, D_{\rho,0}$ ($\rho = 1, 2, \dots$). Dans chaque bande verticale entre les droites verticales $x = x_\rho, x = x_{\rho+1}$ on a deux constantes $C_{\rho,0}, D_{\rho,0}$, ou bien, si l'on divise le numérateur et le dénominateur de (106) par $C_{\rho,0}$, et si l'on introduit la

grandeur $d_{\rho,0} = \frac{D_{\rho,0}}{C_{\rho,0}}$, on disposera d'un paramètre indéterminé $d_{\rho,0}$, dans chaque bande verticale. On peut se servir de ces paramètres, comme dans le cas de la solution (105), pour que la fonction Ψ (106) prenne une suite de valeurs données r_ρ ($\rho = 1, 2, \dots$) pour y donné. Nous ferons aussi la simplification comme (114) :

$$(118) \quad \left\{ \begin{array}{l} C_{0,0} = C_{1,0} = \dots = C_{\rho,0} = C \\ D_{0,0} = D_{1,0} = \dots = D_{\rho,0} = D \end{array} \right.$$

que l'on peut écrire d'une autre manière :

$$(119) \quad d_{0,0} = d_{1,0} = \dots = d_{\rho,0} = d.$$

Nous pouvons enfin donner cette deuxième forme de la solution, provenant de (106), en supprimant en même temps l'indice ρ :

$$(120) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Psi(x, y) = [(n_{11} + n_{12}d)e^{-i\beta(x,y)y} \\ \quad + (n_{21} + n_{22}d)e^{i\beta(x,y)y}] [(m_{11}A_{0,0} \\ \quad + m_{12}B_{0,0})e^{-i\alpha(x,y_0)x} + (m_{21}A_{0,0} \\ \quad + m_{22}B_{0,0})e^{i\alpha(x,y_0)x}] \frac{Ce^{-i\beta(x_0,y_0)y_0} + De^{i\beta(x_0,y_0)y_0}}{e^{-i\beta(x,y_0)y_0} + de^{i\beta(x,y_0)y_0}} \end{array} \right.$$

où l'on doit écrire cette fois pour les éléments m et n en (120), exprimés comme des fonctions de x et de y : $m_{11}(x, y_0)$, ... et $n_{11}(x, y)$...

Nous pouvons maintenant généraliser la solution précédente de l'équation de Schrödinger dans le cas d'un nombre quelconque de corpuscules dans un champ quelconque. L'équation d'onde dans l'espace de configuration est :

$$(121) \quad \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \Delta_i \Psi + \frac{8\pi^2}{h^2} [E - F(x_1, \dots, x_{3N})] \Psi = 0.$$

Nous pouvons considérer que $x_1, \dots, x_{3N}$, varient dans un intervalle donné x_0x' . Divisons cet intervalle en n parties, en admettant que le potentiel ait une valeur constante quand chaque corpuscule se meut dans un intervalle élémentaire. La solution de l'équation d'onde pour ces petites variations des variables sera le produit de $3N$ fonctions, chaque fonction étant une combinaison linéaire de deux fonctions exponentielles d'une seule variable. Pour un choix déterminé des

intervalles on peut écrire la solution correspondante sous la forme :

$$(122) \quad \left\{ \begin{array}{l} \Psi_{k,l,\dots,p}(x_1, x_2, \dots, x_{3N}) \\ = \prod_{j=1}^N [(A_j)_{k,l,\dots,p} e^{-i(\alpha_j)_{k,l,\dots,p} x_j} + (B_j)_{k,l,\dots,p} e^{i(\alpha_j)_{k,l,\dots,p} x_j}]. \end{array} \right.$$

On doit écrire $2.3N$ conditions de continuité comme (90) sur les limites des barrières élémentaires voisines. De ces conditions on peut éliminer les amplitudes à l'aide de $3N$ matrices à deux lignes et à deux colonnes, et l'on arrivera enfin à une forme de la fonction d'onde Ψ comme (105). La question de convergence dans les éléments des matrices ne diffère pas de celle des cas déjà étudiés.

On peut déterminer les amplitudes $A_j B_j$ de façon que la fonction d'onde prenne une suite de valeurs données : valeurs d'une fonction de x_k , quand les autres variables x_i ($i \neq k$) ont des valeurs fixes. Si nous posons que toutes les amplitudes A_j sont égales à une grandeur A , et de même pour les autres amplitudes, cela équivaut à poser que si les corpuscules se trouvent assez loin l'un de l'autre, pour qu'on puisse négliger leurs interactions mutuelles, la fonction d'onde se décompose en produit d'ondes planes monochromatiques. Cela est la condition aux limites pour le problème de choc des corpuscules.

CHAPITRE V

1. Le problème de barrières dans le cas relativiste

Le problème relativiste de passage des corpuscules à travers des barrières de potentiel sera traité avec l'équation de Dirac comme point de départ. Nous donnerons d'abord quelques notions élémentaires de la théorie de Dirac.

L'équation de Schrödinger n'est pas relativiste. Elle ne contient pas non plus l'effet du spin de l'électron. On sait que cette équation peut être trouvée d'une manière formelle en partant de l'équation classique de Hamilton. Pour cela il faut remplacer dans cette dernière équation en coordonnées rectangulaires les moments conjugués p_k des coordonnées q_k par les opérateurs $-\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_k}$, et la fonction S de Hamilton, par la fonction d'onde.

On a tenté de trouver l'équation d'onde relativiste en suivant le même chemin. Dans la relativité restreinte on a la relation suivante :

$$(123) \quad \frac{1}{c^2} (W - \varepsilon V)^2 - \sum_{x,y,z} (p_x - \frac{\varepsilon}{c} A_x)^2 - m^2 c^2 = 0$$

où W est l'énergie totale de l'électron, V , son énergie potentielle, et $A(A_x, A_y, A_z)$, le vecteur potentiel. En introduisant les opérateurs :

$$(124) \quad \left\{ \begin{array}{l} P_1 = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\varepsilon A_x}{c}, \quad P_2 = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\varepsilon A_y}{c}, \\ P_3 = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\varepsilon A_z}{c}, \quad P_4 = \frac{1}{c} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\varepsilon V}{c}, \end{array} \right.$$

on trouve un opérateur qui, appliqué sur la fonction d'onde donne l'équation :

$$(125) \quad (P_4^2 - \sum_{i=1}^3 P_i^2 - m_0^2 c^2) \Psi = 0$$

que l'on a considérée comme équation d'onde relativiste. Mais cette équation a quelques défauts graves comme l'a montré M. Dirac. D'abord elle ne permet pas de définir une densité de probabilité de présence qui soit toujours positive. D'un autre côté l'équation (125) est de deuxième ordre par rapport à t , et pour connaître la fonction Ψ à chaque instant, il faut avoir les valeurs initiales de Ψ et de $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$. Pour écarter cette dernière difficulté on doit prendre une équation, qui soit de premier ordre par rapport à t , et le principe de relativité exige, qu'elle le soit aussi pour x , y et z . Dirac admet que l'équation (125) est une conséquence d'une équation de premier ordre, à plusieurs fonctions d'onde, que l'on trouve en décomposant (125) en deux facteurs de premier ordre. Cette équation est [2] :

$$(126) \quad (P_4 + \sum_{i=1}^3 d_i P_i + \alpha_4 m_0 c) \Psi_k = 0 \quad (k = 1, 2, 3, 4).$$

Les α_i sont des matrices hermitiques à quatre lignes et à quatre colonnes, qui ont les propriétés d'anticommutativité :

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 0 \quad (i \neq k), \quad \alpha_i^2 = 1 \quad (i, k = 1, 2, 3, 4)$$

et agissent sur les fonctions Ψ_k ($k = 1, \dots, 4$) d'après la relation $\alpha_i \Psi_k = \sum_{l=1}^4 (\alpha_i)_{kl} \Psi_l$.

La forme explicite de (126) est :

$$(127) \left\{ \begin{aligned} & \left(\frac{1}{c} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\varepsilon}{c} V + m_0 c \right) \Psi_1 - \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right. \\ & \quad \left. - \frac{\varepsilon A_x}{c} - i \frac{\varepsilon A_y}{c} \right) \Psi_4 - \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\varepsilon A_z}{c} \right) \Psi_3 = 0 \\ & \left(\frac{1}{c} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\varepsilon}{c} V + m_0 c \right) \Psi_2 - \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right. \\ & \quad \left. - \frac{\varepsilon A_x}{c} + i \frac{\varepsilon A_y}{c} \right) \Psi_3 - \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\varepsilon A_z}{c} \right) \Psi_4 = 0 \\ & \left(\frac{1}{c} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\varepsilon}{c} V - m_0 c \right) \Psi_3 - \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right. \\ & \quad \left. - \frac{\varepsilon A_x}{c} - i \frac{\varepsilon A_y}{c} \right) \Psi_2 - \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\varepsilon A_z}{c} \right) \Psi_1 = 0 \\ & \left(\frac{1}{c} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\varepsilon}{c} V - m_0 c \right) \Psi_4 - \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y} \right. \\ & \quad \left. - \frac{\varepsilon A_x}{c} + i \frac{\varepsilon A_y}{c} \right) \Psi_1 - \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\varepsilon A_z}{c} \right) \Psi_2 = 0 \end{aligned} \right.$$

Connaissant le système de fonctions Ψ_k qui satisfont aux équations (127), la probabilité de présence du corpuscule dans le volume $dx dy dz$ est $\sum_{i=1}^4 \Psi_i \Psi_i^* dx dy dz$. Mais la détermination d'une telle solution n'est pas facile, si les champs sont quelconques. Dans le cas où $\vec{A} = 0$, et V est fonction d'une seule des variables, il existe la méthode de Pauli [13] de résolution de l'équation de Dirac.

2. Passage des corpuscules à travers une barrière de potentiel rectangulaire.

Nous étudierons maintenant le passage des corpuscules, dont le mouvement est décrit par l'équation de Dirac, au travers d'une barrière de potentiel. Ce problème a été traité par O. Klein [12].

Prenons le cas dans lequel le mouvement des corpuscules s'effectue suivant une direction donnée OX. Supposons que l'énergie potentielle soit nulle à gauche d'un point M d'abscisse x_0 , et qu'elle a une valeur constante P à droite de M.

Le vecteur potentiel est nul partout. Les corpuscules qui se propagent de gauche à droite avec une vitesse constante, viennent et frappent la surface de séparation en M. Une partie des corpuscules se réfléchit, une autre entre dans le deuxième milieu. L'équation de propagation à gauche de M est :

$$(128) \quad \left(\frac{1}{c} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} + \alpha_4 m_0 c - \frac{h}{2\pi i} \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_k = 0$$

et à droite de M :

$$(129) \quad \left(\frac{1}{c} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{P}{c} + \alpha_4 m_0 c - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_k = 0.$$

Nous chercherons comme solution de (128) l'onde plane monochromatique représentée par le système de quatre fonctions $(\Psi_i)_k$ ($k = 1, \dots, 4$).

$$(130) \quad (\Psi_i)_k = (a_i)_k e^{\frac{2\pi i}{h} (Et - px)}$$

où toutes les amplitudes $(a_i)_k$ sont constantes. En transportant (130) dans (128), nous trouverons la condition d'existence de la solution sous la forme d'un déterminant égal à zéro. En le développant, on trouve :

$$(131) \quad \left(\frac{E^2}{c^2} - m_0^2 c^2 - p^2 \right)^2 = 0.$$

Nous savons que (131) est réalisée toujours d'après (123). On vérifie aussi que tous les sous-déterminants à trois lignes et à trois colonnes du déterminant ci dessus mentionné sont nuls. Donc des quatre grandeurs $(a_i)_k$ ($k = 1, 2, 3, 4$) deux seulement sont indépendantes, par exemple $(a_i)_3$ et $(a_i)_4$. Posons $(a_i)_3 = A$, $(a_i)_4 = B$. Les équations (128) donnent :

$$(132) \quad (a_i)_1 = -\frac{pA}{\frac{E}{c} + m_0 c}, \quad (a_i)_2 = \frac{pB}{\frac{E}{c} + m_0 c}.$$

Nous connaissons donc l'onde incidente Ψ_i . Pour l'onde réfléchie Ψ_r nous pouvons poser :

$$(133) \quad (\Psi_r)_k = (a_r)_k e^{\frac{2\pi i}{h}(Et + px)} \quad (k = 1, 2, 3, 4).$$

Pour les $(a_r)_k$ nous aurons la même condition (131). Deux des $(a_r)_k$ seront indépendantes, par exemple $(a_r)_3 = C$ et $(a_r)_4 = D$. On trouvera de même pour les autres amplitudes :

$$(134) \quad (a_r)_1 = \frac{pC}{\frac{E}{c} + m_0c}, \quad (a_r)_2 = -\frac{pD}{\frac{E}{c} + m_0c}.$$

A l'intérieur du deuxième milieu l'équation d'onde pour l'onde transmise Ψ_t sera l'équation (129), dont la solution est l'onde Ψ_t :

$$(135) \quad (\Psi_t)_k = (a_t)_k e^{\frac{2\pi i}{h}\left(\frac{E-P}{c}t - p_1x\right)}.$$

De la même manière nous trouverons qu'il y a deux amplitudes indépendantes $(a_t)_3 = C_1$ et $(a_t)_4 = D_1$, et les deux autres amplitudes sont :

$$(136) \quad (a_t)_1 = \frac{-p_1C_1}{\frac{E-P}{c} + m_0c}, \quad (a_t)_2 = \frac{p_1D_1}{\frac{E-P}{c} + m_0c}.$$

Quand l'onde dans la mécanique de Dirac traverse un mur de potentiel, elle reste continue. On le démontre [12] comme pour l'onde Ψ de l'équation de Schrödinger. Appliquons cela pour notre problème. La fonction d'onde qui existe à gauche du point M est une superposition de l'onde incidente et de l'onde réfléchie. Sur la surface de séparation elle doit être égale à l'onde transmise. Cela donne les conditions de continuité :

$$(137) \quad (\Psi_i)_k + (\Psi_r)_k = (\Psi_t)_k \quad (k = 1, 2, 3, 4).$$

De ces quatre égalités linéaires on peut tirer les amplitudes C, D, C_1, D_1 en fonction de A et de B , que l'on considère comme données :

3. Résolution du problème relativiste des barrières par la méthode de décomposition des barrières.

Supposons que les électrons qui se propagent suivant OX positif aient à traverser une barrière de potentiel, qui s'étend de x_0 à x' . Le potentiel est supposé nul des deux côtés de la barrière. Le problème consiste à trouver la proportion de corpuscules réfléchis et transmis. Si la forme de la barrière est rectangulaire (P constant dans la barrière), le problème est facile, puisqu'on connaît la solution de l'équation de Dirac à l'intérieur de la barrière. La solution de l'équation entre x_0 et x' est une somme de deux ondes se propageant à gauche et à droite. On doit écrire les conditions de continuité, semblables à (137) qui existent aux deux limites de la barrière. Pour chaque onde on aura deux amplitudes indépendantes. En somme on aura dix amplitudes et huit conditions de continuité, d'où l'on exprimera huit des amplitudes en fonction de celles de l'onde incidente.

Prenons une barrière qui s'étend de x_0 à x' , de forme quelconque, c'est-à-dire le potentiel est une fonction donnée $P(x)$ de x , que nous supposerons continue et bornée. Divisons l'intervalle x_0x' en n parties, et la barrière en petites barrières élémentaires, comme nous l'avons déjà fait pour l'équation de Schrödinger. Nous considérerons que dans chaque barrière élémentaire de base (x_{l+1}, x_l) , le potentiel aura la valeur constante $P(x_l)$, donc nous aurons comme solution de l'équation de Dirac entre (x_{l+1}, x_l) une somme de deux ondes planes monochromatiques. En indiquant avec ψ_l l'onde qui se propage à droite, et avec φ_l celle qui se propage à gauche, leurs composantes respectives seront données par :

$$(138) \quad \psi_{l,k} = a_{l,k} e^{\frac{2\pi i}{h} (Et - p_l x)}, \quad \varphi_{l,k} = b_{l,k} e^{\frac{2\pi i}{h} (Et + p_l x)}, \\ (k = 1, \dots, n) \quad (l = 1, 2, \dots, n).$$

Sur la limite commune des barrières (x_{l-1}, x_l) et (x_l, x_{l+1}) on aura les quatre conditions de continuité :

$$(139) \quad \Psi_{l,k}(x_l) + \varphi_{l,k}(x_l) = \Psi_{l+1,k}(x_l) + \varphi_{l+1,k}(x_l) \quad (k = 1, 2, 3, 4).$$

Les quatre amplitudes qui caractérisent chaque onde seront exprimées par deux d'entre elles puisque, étant liées par une égalité de la forme de (131), il n'y a que deux indépendantes entre les quatre amplitudes. Nous indiquerons par :

$$(140) \quad A_l = a_{l,3}, \quad B_l = a_{l,4}$$

les amplitudes indépendantes de l'onde, qui se propage à droite, et par :

$$(141) \quad C_l = b_{l,3}, \quad D_l = b_{l,4}$$

celles de l'onde, se propageant à gauche. En posant :

$$(142) \quad g_l = \frac{p_l}{\frac{E - p_l}{c} + m_0 c}$$

nous aurons, exactement comme pour les formules (132) :

$$(143) \quad \begin{cases} a_{l,1} = -g_l A_l, & a_{l,2} = g_l B_l; \\ b_{l,1} = g_l C_l, & b_{l,2} = -g_l D_l \end{cases}$$

puisque l'on a, en somme, toujours le même problème que celui de la page 84, l'onde plane en théorie de Dirac. A l'aide des notations précédentes nous pouvons maintenant écrire explicitement les conditions (139) :

$$(144) \quad \begin{cases} g_l(A_l e^{-ip_l x_l} - C_l e^{ip_l x_l}) = g_{l+1}(A_{l+1} e^{-ip_{l+1} x_l} - C_{l+1} e^{ip_{l+1} x_l}) \\ A_l e^{-ip_l x_l} + C_l e^{ip_l x_l} = A_{l+1} e^{-ip_{l+1} x_l} + C_{l+1} e^{ip_{l+1} x_l} \\ g_l(B_l e^{-ip_l x_l} - D_l e^{ip_l x_l}) = g_{l+1}(B_{l+1} e^{-ip_{l+1} x_l} - D_{l+1} e^{ip_{l+1} x_l}) \\ B_l e^{-ip_l x_l} + D_l e^{ip_l x_l} = B_{l+1} e^{-ip_{l+1} x_l} + D_{l+1} e^{ip_{l+1} x_l} \end{cases}$$

De ce système d'équations linéaires par rapport aux quatre grandeurs A, C, B, D , on peut exprimer les amplitudes d'indice $l+1$ en fonction de celles d'indice l . Le détermi-

nant Δ_{l+1} des coefficients des amplitudes de la partie droite des équations (144) a la valeur 4. On peut considérer les amplitudes A_{l+1} , C_{l+1} , B_{l+1} , D_{l+1} , comme composantes d'un vecteur $\vec{r}_{l+1}$. Les équations (144) expriment une transformation du vecteur $\vec{r}_{l+1}$ en vecteur $\vec{r}_l$ à l'aide d'une matrice M_l à quatre lignes et à quatre colonnes :

$$(145) \quad \vec{r}_{l+1} = M_l \vec{r}_l.$$

Il est facile de résoudre les équations (144), et l'on trouve pour $M_l = \| (m_l) \alpha \beta \|$, ($\alpha \beta = 1, 2, 3, 4$)

$$(146) \quad \left\{ \begin{array}{l} (m_l)_{11} = (1 + \rho_l) e^{-i(p_{l+1} - p_l)x_l}, \quad (m_l)_{12} = (1 - \rho_l) e^{i(p_{l+1} + p_l)x_l} \\ (m_l)_{21} = (1 - \rho_l) e^{-i(p_{l+1} + p_l)x_l}, \quad (m_l)_{22} = (1 + \rho_l) e^{-i(p_{l+1} - p_l)x_l} \\ (m_l)_{33} = (1 + \rho_l) e^{i(p_{l+1} - p_l)x_l}, \quad (m_l)_{34} = (1 - \rho_l) e^{i(p_{l+1} + p_l)x_l} \\ (m_l)_{43} = (1 - \rho_l) e^{-i(p_{l+1} + p_l)x_l}, \quad (m_l)_{44} = (1 + \rho_l) e^{-i(p_{l+1} - p_l)x_l} \\ (m_l)_{13} = (m_l)_{14} = (m_l)_{23} = (m_l)_{24} = \\ (m_l)_{31} = (m_l)_{32} = (m_l)_{41} = (m_l)_{42} = 0 \end{array} \right.$$

où l'on a posé $\rho_l = \frac{g_l}{g_{l+1}}$. D'après (142), g_l et g_{l+1} ont des valeurs voisines, par conséquent la valeur de ρ_l est voisine de l'unité. La différence $p_{l+1} - p_l$ est très petite. Puisque tous les termes de M_l sont divisés par $\frac{1}{2}$, il suit que tous les termes de la diagonale principale ont des valeurs voisines de l'unité, et les autres termes sont très petits, donc M_l est presque diagonale. En faisant les éliminations successives des amplitudes, on arrivera à la relation :

$$(147) \quad r_{l+j} = M_{l+j-1} M_{l+j-2} \dots M_l \vec{r}_l = M_{l,j} \vec{r}_l$$

où $M_{l,j}$ est la matrice produit. Si l'on introduit les deux matrices σ_l et τ_l , en lesquelles se décompose la matrice M_l , elle s'écrira :

$$(148) \quad M_l = \begin{vmatrix} \sigma_l & 0 \\ 0 & \tau_l \end{vmatrix}$$

Grâce à cette forme de M_l , la matrice $M_{l,j}$ (147) sera formée de deux matrices σ et τ telles que $\sigma = \sigma_{l+j-1} \sigma_{l+j-2} \dots \sigma_l$, et $\tau = \tau_{l+j-1} \tau_{l+j-2} \dots \tau_l$. D'un autre côté nous avons posé $\rho_l = \frac{g_l}{g_{l+1}}$, où g (142) est une fonction connue de x . On peut donc écrire :

$$\rho_l = \frac{g_l}{g_l + \Delta g_l} = 1 - \frac{\Delta g_l}{g_l}$$

$$\frac{1}{2}(1 + \rho_l) = 1 - \frac{\Delta g_l}{2g_l} = e^{-\frac{\Delta g_l}{2g_l}}; \quad \frac{1}{2}(1 - \rho_l) = \frac{\Delta g_l}{2g_l}.$$

En s'arrêtant toujours aux infiniment petits de premier ordre, on peut représenter la matrice σ_l de la façon suivante :

$$(149) \quad \sigma_l = \begin{vmatrix} e^{i\Delta p_l x_l - \frac{\Delta g_l}{2g_l}} & \frac{\Delta g_l}{2g_l} e^{2ip_l x_l} \\ \frac{\Delta g_l}{2g_l} e^{-2ip_l x_l} & e^{-i\Delta p_l x_l - \frac{\Delta g_l}{2g_l}} \end{vmatrix}$$

et de même pour la matrice τ_l . Maintenant σ_l et τ_l ont tout à fait la même forme que la matrice M_j (16). Il n'y a donc aucune difficulté à former les produits σ et τ , puisque les éléments des matrices σ et τ sont composés comme ceux de la matrice M (12'). Les éléments $\sigma_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2$) seront donnés par des séries infinies comme (34). On aura donc $\sigma_{11} = \sum_{i=0}^{\infty} \sigma_{11}^{2i}, \dots$ et de même $\tau_{11} = \sum_{i=0}^{\infty} \tau_{11}^{2i}, \dots$. Les intégrales dans $\sigma_{\alpha\beta}$ et $\tau_{\alpha\beta}$ étant fonctions de leur limite supérieure, $\sigma_{\alpha\beta}$ et $\tau_{\alpha\beta}$ seront des fonctions connues de x . A l'aide des matrices σ et τ ainsi trouvées on écrit immédiatement la matrice $M_{l,j}$. Connaître la matrice $M_{l,j}$, c'est connaître la solution de l'équation de Dirac, puisque cette solution était donnée dans chaque intervalle (x_{l+1}, x_l) par les fonctions (138), et pour trouver cette solution dans tout l'intervalle $x_0 x'$, on n'a besoin que des coefficients $a_{l,k}$, $b_{l,k}$ en fonction de x , que nous donne la connaissance de la matrice $M_{l,j}$. En ne retenant que les éléments σ_{11}^0 et σ_{22}^0 de la

diagonale principale de σ , et d'une façon analogue les éléments τ_{11}^0 et τ_{22}^0 de τ , la solution de l'équation de Dirac, que l'on trouve ainsi, coïncide avec la solution de Pauli [13] dans le cas, où l'optique géométrique est valable.

Puisque les deux premières équations (144) ne contiennent que les amplitudes A et C , on peut déterminer d'après ces deux équations seulement A_{l+1} et C_{l+1} en fonction de A_l et C_l à l'aide de la matrice σ_l . De même on déterminera B_{l+1} et D_{l+1} d'après les deux dernières équations (144) à l'aide de la matrice τ_l . On pouvait donc se passer de la matrice M_l (146), mais nous nous en sommes servi, parce qu'il y a des cas, où le système (144) ne se décompose pas en deux groupes d'équations, contenant chacun deux seulement des amplitudes.

Le cas où le vecteur potentiel n'est pas nul, et où le potentiel scalaire est une fonction de toutes les coordonnées, la résolution de l'équation de Dirac présente beaucoup plus de difficultés, et nous ne nous occuperons pas ici de ce cas.

BIBLIOGRAPHIE

1. Louis de BROGLIE. — *Théorie de la quantification dans la nouvelle Mécanique*. Paris, Hermann (1932).
2. Louis de BROGLIE. — *L'électron magnétique*. Paris, Hermann, (1933).
3. Louis de BROGLIE. — Passage des corpuscules électrisés à travers une barrière de potentiel. *Ann. de l'Inst. H. Poincaré* (1932-1933).
4. M. F. MANNING — Exact solutions of the Schrödinger Equation. *Phys. Rev.*, **48** (1935), 173.
5. L. BRILLOUIN. — Remarques sur la Mécanique ondulatoire. *Journ. de Phys. et de Radium*, **7** [12] (1926), 353.
6. G. WENTZEL. — Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik. *Z. f. Phys.*, **38** (1926), 518.
7. H. A. KRAMERS. — Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung. *Z. f. Phys.*, **39** (1926), 828.
8. R. H. FOWLER and L. NORDHEIM. — Electron Emissions in Intense Electric Fields. *Pr. R. Soc.*, **119** (1928), 173.
9. A. DATZEFF. — Sur le passage des corpuscules à travers des barrières de potentiel. *C. R.*, **204** (1937), 558.
10. A. DATZEFF. — Sur la solution de l'équation de Schrödinger. *C. R.*, **204** (1937) 1616.
11. M. BORN. — Quantenmechanik der Stossvorgänge. *Z. f. Phys.*, **37** (1926), 863.
12. O. KLEIN. — Die reflexion von Electronen von einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac. *Z. f. Phys.*, **53** (1929), 157.
13. W. PAULI. — Diracs Wellengleichung des Electrons und geometrische Optik. *Helv. Ph. Acta*, **5** (1932), 179.
14. R. COURANT und D. HILBERT. — *Methoden der mathematischen Physik*. J. Springer, 1931.
15. E. T. WHITTAKER and G. N. WATSON. — *A Course of Modern Analysis*. Cambridge, 1927, 5^e éd.
16. G. N. WATSON. — *A Treatise on the Theory of Bessel functions*. Cambridge, 1922.

DEUXIÈME THÈSE

PROPOSITIONS DONNÉES PAR LA FACULTÉ

Capture par résonance des neutrons lents.

VU ET APPROUVÉ :

Paris, le 30 Avril 1938.

Le Doyen de la Faculté des Sciences,
Ch. MAURAIN.

VU ET PERMIS D'IMPRIMER :

Le Recteur de l'Académie de Paris,
G. ROUSSY.

